

К 200-летию Харьковского университета
Серия монографий и учебных пособий

В.В.Ульянов

СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Часть третья



Харьков 2012

К 65-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов

**СБОРНИК ОБЗОРОВ И
СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ
ТЕОРИИ**

(с соавторами и без)

І І І

ОСОБАЯ КВАЗИКЛАССИКА
ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ
ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЯДРА
СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН
ОБОБЩЕННОЕ СООТНОШЕНИЕ
НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Харьков 2012

УДК 530.145

У 51

У 51 **Ульянов В.В.** Сборник обзоров и статей по квантовой теории (с соавторами и без). Часть I I I / В.В.Ульянов. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2012. - 102 с.

Сборник содержит несколько обзоров и статей, в которых затрагиваются различные вопросы квантовой теории.

В третью часть входят обзоры и статьи, посвященные квазиклассике в полях с особенностями, интегральным методам, рассеянию нейтронов в оптической модели ядра, структуре энергетических зон, обобщенным соотношениям неопределенностей.

Сборник продолжает серию изданий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и 65-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Посвящается Льву Элеazarовичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

Издается по решению кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица от 17 мая 2011 года (протокол № 11)

УДК 530.145

ПРЕДИСЛОВИЕ

В сборник включены некоторые обзоры и обзорные статьи, а также небольшие статьи, представляющие для автора особый интерес.

Большая часть этих публикаций написана совместно с моими коллегами по кафедре теоретической физики.

Третья часть содержит статьи, посвященные квазиклассике в полях с особенностями, интегральным методам в квантовой теории локальных неоднородностей и периодических структур, рассеянию нейтронов в оптической модели ядра, структуре энергетических зон и обобщенным соотношениям неопределенностей.

Сборник посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

На последней странице помещены изображения обложек физических журналов, в которых публиковались обзоры и статьи из данного сборника.

Благодарю Александра Михайловича Ермолаева за внимательное отношение к работам автора, за постоянную помощь советами и редкой литературой.

Академия наук СССР
**Журнал экспериментальной и теоретической
физики**
Том 35, вып. 1(7), 1958 г.

Л. Э. Паргаманик, В. В. Ульянов

К ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ
С РАЗЛИЧНЫМИ МОМЕНТАМИ С ПОЛУПРОЗРАЧНЫМИ ЯДРАМИ

К ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ С РАЗЛИЧНЫМИ МОМЕНТАМИ С ПОЛУПРОЗРАЧНЫМИ ЯДРАМИ

Л. Э. Паргаманик, В. В. Ульянов

Изучается вопрос об участии быстрых нейтронов с различными моментами во взаимодействии с полупрозрачными ядрами в рамках модели комплексной прямоугольной ямы. Аппроксимация точных выражений для парциальных сечений с помощью специальных асимптотических формул для цилиндрических функций, справедливых во всем существенном интервале моментов, позволяет уточнить участие волн с моментами $l \sim kR$ в процессах рассеяния и поглощения нейтронов по сравнению с результатами, полученными в квазиклассическом приближении. Получены поправки к интегральным сечениям поглощения и рассеяния, существенные при больших и малых эффективных поглощениях.

В последние годы появилось большое число работ [1-4] по теории рассеяния частиц ядрами, в которых использовалась модель комплексной прямоугольной ямы. С помощью этой модели удалось получить правильный ход сечений с энергией как в области малых, так и больших энергий. При малых энергиях нейтронов в процессе взаимодействия с ядром участвуют лишь волны с небольшими моментами. Поэтому при вычислении сечений можно осуществить непосредственное суммирование парциальных сечений.

При больших энергиях нейтронов с ядром взаимодействует большое число волн (с моментами $l \lesssim kR$) и для вычисления сечения необходимо произвести суммирование по всему существенному интервалу моментов и правильно определить верхнюю границу этого интервала. Кроме того, размытость ядерной границы также влияет на величины сечений.

В работе Фернбаха, Сербера и Тэйлора [1] ядро рассматривалось как однородная среда с некоторым коэффициентом поглощения и показателем преломления. Применение к этой модели квазиклассического метода, основанного на оптической аналогии (в дальнейшем будем называть его оптическим приближением), дало возможность удовлетворительно объяснить результаты опытов по рассеянию нейтронов с энергией порядка 100 MeV, но давало неверный ход для дифференциального сечения рассеяния. Как было показано Пастернаком и Снайдером [5], это расхождение объясняется в значительной части неточностью оптического приближения, а не самой моделью. Оптическое приближение дает правильный ход парциальных сечений лишь для волн с моментами $l \lesssim kR/2$, в области же моментов $l \lesssim kR$ значения парциальных сечений оказываются заниженными, а волны с моментами $l > kR$ — $1/2$ не учитываются вовсе.

Дроздов [3] получил выражение для сечения поглощения быстрых нейтронов, приближенно решив уравнение Шредингера с помощью полуклассического метода Петрашень [6]. Эта работа уточнила результаты грубого оптического приближения, так как метод Петрашень дает хорошую точность в области $l < kR$; однако Дроздов необоснованно применил полученные формулы и в области $l \sim kR$ и обрывал интегрирование на моменте $l = kR - 1/2$ на основании представления о том, что в процессах рассеяния и поглощения участвуют лишь волны с моментами, соответствующими прицельным расстояниям меньшим радиуса ядра.

Таким образом, оба метода [1] и [3] дают хорошие приближения лишь для парциальных волн с моментами $l < kR$. Область же моментов $l \sim kR$ учи-

тывалась некорректно, а интегрирование при вычислении сечений обрывалось на моментах $l = kR - 1/2$. Поэтому представляет интерес более детальное изучение роли переходных моментов $l \sim kR$ во взаимодействии нейтронов с ядром и выяснение того, как ведут себя коэффициенты рассеяния и поглощения в этой области моментов. В настоящей работе этот вопрос изучается на простейшей модели прямоугольной комплексной потенциальной ямы. При такой форме ямы, допускающей точное решение уравнения Шредингера, возможна оценка точности полученных результатов. Кроме того, при этом исключается влияние размытости ядерной границы.

1. Область малых моментов

Для модели прямоугольной комплексной потенциальной ямы естественно исходить не из приближенного решения уравнения Шредингера, а получить точные выражения для коэффициентов рассеяния и поглощения и уже для их суммирования использовать по возможности более точные приближения, учитывая все волны, участвующие во взаимодействии.

Если энергия взаимодействия нейтрона с ядром имеет вид $U(r) = -V - iW$ при $r \leq R$ и $U(r) = 0$ при $r > R$, где R — радиус ядра, то уравнение Шредингера для радиальной волновой функции нейтрона с моментом l и энергией E допускает точное решение, причем коэффициент отражения имеет вид:

$$\beta_l = - \frac{x J_{l+1/2}(z) H_{l-1/2}^{(2)}(x) - z J_{l-1/2}(z) H_{l+1/2}^{(2)}(x)}{x J_{l+1/2}(z) H_{l-1/2}^{(1)}(x) - z J_{l-1/2}(z) H_{l+1/2}^{(1)}(x)}, \quad (1)$$

$$x = kR = \sqrt{2m E^{1/2}} R / \hbar, \quad z = \sqrt{2m (E + V + iW)^{1/2}} R / \hbar,$$

где m — приведенная масса нейтрона и ядра.

Чтобы получить с помощью (1) выражения для коэффициентов рассеяния $|1 - \beta_l|^2$ и поглощения $1 - |\beta_l|^2$, удобные для исследования и интегрирования по всему существенному интервалу моментов, необходимо применить асимптотические формулы для цилиндрических функций. Однако обычные формулы, предполагающие $l \ll x$ и $l \sim x$, применимы лишь в довольно узкой области моментов: порядка $x^{1/2}$ для малых моментов и меньше $x^{1/2}$ для $l \sim x$. Поэтому ниже используются специальные формулы для цилиндрических функций в области $l < x$ [7] и формулы, полученные Фоком [8] в области $l \sim x$.

В области моментов l меньших x применяемые асимптотические формулы, например, для функций Бесселя, имеют вид:

$$J_\nu(\nu \sec \beta) = \sqrt{\frac{2}{\pi \nu \tan \beta}} [\cos(\nu \tan \beta - \nu \beta) + O(1/\nu \tan \beta)].$$

Сохранение первого члена в этом разложении дает ошибку порядка $1/3 \nu \tan \beta$; в области моментов $l < 3x/4$ эта ошибка не превышает 5%. Такое приближение дает для коэффициента отражения формулу

$$\beta_l = \exp \left\{ 2i \left[\sqrt{z^2 - (l + 1/2)^2} - \sqrt{x^2 - (l + 1/2)^2} + (l + 1/2) \left(\arccos \frac{l + 1/2}{x} - \arccos \frac{l + 1/2}{z} \right) \right] \right\}, \quad (2)$$

что совпадает с результатом, полученным Дроздовым [3].

При больших энергиях, когда $\eta \equiv \text{Im } z \ll x$ и $\xi \equiv \text{Re } z - x \ll x$, фаза на бесконечности δ_l , связанная с коэффициентом отражения соотношением $\beta_l = e^{2i\delta_l}$, имеет вид:

$$\delta_l = (\xi + i\eta) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{l+1/2}{x} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{l+1/2}{x} \right)^4 - \dots \right] \approx (\xi + i\eta) \sqrt{1 - (l+1/2)^2/x^2}.$$

В оптическом приближении [1]

$$\delta_l = [(n-1)x + iKR/2] \sqrt{1 - (l+1/2)^2/x^2}, \quad (3)$$

где K — коэффициент поглощения, n — показатель преломления. Таким образом, при больших энергиях устанавливается соответствие между параметрами: η соответствует $KR/2$, а ξ соответствует $(n-1)x$, что дает возможность сравнивать результаты оптического приближения с нашими. Так как η зависит не только от мнимой части W потенциала, но и от действительной части V , от энергии нейтрона и от массы ядра, то в дальнейшем мы будем называть этот параметр «эффективным поглощением». Аналогично ξ будем называть «эффективным преломлением».

2. Область переходных моментов

Особый интерес представляет область моментов $l \sim x$. Для аппроксимации выражения (1) в этой области моментов применим асимптотические формулы для цилиндрических функций, принадлежащие Фоку [8]. Например для функции Бесселя:

$$J_{l+1/2}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{2} \right)^{-1/2} \left\{ v(\tau) - \frac{1}{60} \left(\frac{z}{2} \right)^{-3/2} [\tau^2 v'(\tau) + 4\tau v(\tau)] + \dots \right\}. \quad (4)$$

С помощью этих формул выражение для коэффициента отражения приводится к виду

$$\beta_l = \frac{xv(\tau)w^*(t') - zv(\tau')w^*(t)}{xv(\tau)w(t') - zv(\tau')w(t)}, \quad (5)$$

где

$$w(t) = \sqrt{\pi/3} e^{2\pi i/3} (-t)^{1/2} H_{1/2}^{(1)} [2/3 (-t)^{3/2}] = u(t) + iv(t),$$

$$w^*(t) = u(t) - iv(t),$$

$$t = (l+1/2-x)/(x/2)^{1/2}, \quad t' = (l-1/2-x)/(x/2)^{1/2},$$

$$\tau = (l+1/2-z)/(z/2)^{1/2}, \quad \tau' = (l-1/2-z)/(z/2)^{1/2}.$$

В формуле (5) сохранены только первые члены разложения (4). Такое приближение вносит ошибку порядка $|t|^{3/2}/60(x/2)^{3/2}$; в области моментов $|l-x| \lesssim x^{1/2}$ эта ошибка не превышает 2%. Следовательно, формула (2) дает хорошее приближение для коэффициента отражения в области $l < x$, а формула (5) — в области $l \sim x$, причем весь существенный интервал моментов оказывается перекрытым.

Вычислив с помощью (5) коэффициенты рассеяния и поглощения и разложив полученные выражения по степеням $(x/2)^{1/2}$, получим:

$$|1 - \beta_l|^2 = 4(\xi^2 + \eta^2) \frac{[v'(t)^2 - tv(t)^2]}{(x/2)^{3/2}}, \quad (6)$$

$$1 - |\beta_l|^2 = 4\eta \frac{v'(t)^2 - tv(t)^2}{(x/2)^{1/2}}. \quad (7)$$

При переходе от отрицательных к положительным значениям аргумента функция Эйри $v(t)$ переходит от осциллирующего хода к экспоненци-

альному убыванию. Поэтому коэффициенты рассеяния и поглощения резко убывают, начиная с некоторого характерного значения $l_0 \sim x - 1/2$. Однако l_0 в общем случае не совпадает с $x - 1/2$: для коэффициентов поглощения при больших эффективных поглощениях ($\eta > (x/2)^{1/2}$) $l_0 \gtrsim x - 1/2$, а при малых ($\eta \ll 1$) $l_0 < x - 1/2$. Оказывается, что волны с моментами $l > x - 1/2$ вносят существенный вклад в сечения поглощения при

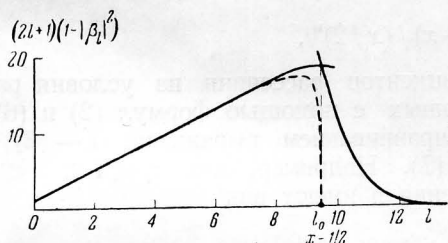


Рис. 1. Ход парциальных сечений поглощения при параметрах $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 1,875$; сплошные кривые получены с помощью формул (2) и (7), пунктирная — оптическое приближение (3)

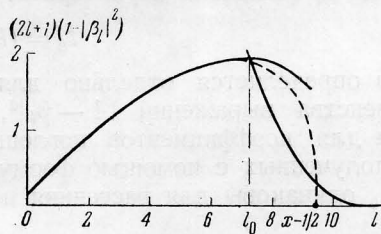


Рис. 2. Ход парциальных сечений поглощения при параметрах $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 0,05$; сплошные кривые получены с помощью формул (2) и (7), пунктирная — оптическое приближение (3)

больших эффективных поглощениях (см. рис. 1): их учет дает поправку порядка 20% при сравнительно небольших энергиях ($x \sim 10$, $\eta \sim 2$). При малых эффективных поглощениях ($\eta \ll 1$) парциальные сечения поглощения начинают резко убывать уже при $l < x - 1/2$ (см. рис. 2), так что в области $l \ll x$ приближения, принятые в [1] и [3], дают для них неверный ход, в результате чего получается завышенная величина сечения (порядка 20% при $x \sim 10$). Для парциальных сечений рассеяния область моментов $l > x - 1/2$ оказывается несущественной для всех разумных значений эффективного поглощения и преломления. Сравнение возможно лишь с результатами оптического приближения, так как в работе Дроздова [3] исследуется лишь поглощение нейтронов. Ниже показано, что существенное отличие от результатов оптического приближения наблюдается лишь при малых эффективных поглощениях и преломлениях, причем в этом случае оптическое приближение дает несколько завышенный результат.

3. Сечения рассеяния и поглощения

Полученные приближения для коэффициентов отражения, рассеяния и поглощения (2), (6) и (7) дают возможность вычислить сечения интегрированием¹ по всему интервалу моментов (отдельно в области $l \leq l_0$ и в области $l \geq l_0$). Произведя интегрирование, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_s}{\pi R^2} = & \int_0^{\infty} (2l+1) |1 - \beta_l|^2 dl = \left[1 + \frac{t_0}{(x/2)^{3/2}} + \dots \right] \times \\ & \times \left\{ 1 + e^{-4\eta} [1 + \eta + \dots] - 2e^{-2\eta} \left[\cos 2\xi \left(1 + \frac{\eta}{2} + \dots \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin 2\xi \left(\frac{\xi}{2} + \dots \right) \right] \right\} + \frac{4(\xi^2 + \eta^2)}{(x/2)^{3/2}} (0,011 - 0,044t_0 + \dots), \end{aligned} \quad (8)$$

¹ Относительная ошибка, возникающая при замене суммирования парциальных сечений рассеяния и поглощения (это суммирование должно выполняться при вычислении сечений) интегрированием, оказывается весьма малой ($\sim x^{-2}$) и может не учитываться.

$$\frac{\sigma_c}{\pi R^2} = \int_0^\infty (2l+1)(1-|\beta_l|^2) dl = \left[1 + \frac{t_0}{(x/2)^{1/2}} + \dots \right] \times \\ \times \left\{ 1 - e^{-4\eta} [1 + \eta + \dots] + \frac{8\eta}{x} [0,096 - 0,21 t_0 + \dots] \right\}, \quad (9)$$

где t_0 связано с характерным l_0 :

$$t_0 = (l_0 + 1/2 - x) / (x/2)^{1/2},$$

и определяется отдельно для коэффициентов рассеяния из условия равенства выражений $|1 - \beta_l|^2$, полученных с помощью формул (2) и (6), и для коэффициентов поглощения приравниванием выражений $1 - |\beta_l|^2$, полученных с помощью формул (2) и (7). Например, для $\eta \ll 1$ и $\xi \ll 1$ t_0 одинаковы для рассеяния и поглощения и имеют вид

$$t_0 = 0,685 - 1,315(x/2)^{1/2} + 0,1/(x/2)^{1/2} - \dots, \quad (10)$$

а при больших η для поглощения

$$t_0 = 0,53 - 0,63(x/2)^{1/2}/\eta + \dots \quad (11)$$

Для сравнения с результатами оптического приближения и приближения Дроздова приведем формулы (8) и (9) для сечений, выраженные через эффективное поглощение η и эффективное преломление ξ , в предельных случаях. В зависимости от соотношения между энергией нейтрона и параметрами потенциальной ямы выражения для η и ξ имеют вид:

для $W < V < E$ ($x > y$, $\zeta < 1$):

$$\eta = \sqrt{\frac{mR^2}{2\hbar^2 E}} W \left(1 - \frac{V}{2E} + \dots \right) = \frac{\zeta y^2}{2x} \left(1 - \frac{y^2}{2x^2} + \dots \right), \quad (12)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{mR^2}{2\hbar^2 E}} V \left(1 - \frac{V}{4E} + \dots \right) = \frac{y^2}{2x} \left(1 - \frac{(1-\zeta^2)y^2}{4x^2} + \dots \right);$$

для $W < E < V$ ($\zeta y^2 < x^2 < y^2$):

$$\eta = \sqrt{\frac{mR^2 V}{2\hbar^2}} W \left(1 - \frac{E}{2V} + \dots \right) = \frac{\zeta y}{2} \left(1 - \frac{x^2}{2y^2} + \dots \right), \quad (13)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{2mR^2 V}{\hbar^2}} \left(1 - \sqrt{\frac{E}{V}} + \frac{E}{2V} - \dots \right) = y \left(1 - \frac{x}{y} + \frac{x^2}{2y^2} - \dots \right),$$

где

$$y = \sqrt{2m} V^{1/2} R / \hbar, \quad \zeta = W/V.$$

При малых эффективных поглощениях ($\eta \ll 1$) из формул (9), (10) и (12) получаем²:

$$\frac{\sigma_c}{\pi R^2} = 2,72\eta \left(1 - \frac{1,86}{x^{1/2}} + \frac{1,48}{x^{3/2}} - \dots \right) = \\ = 1,36 \frac{\zeta y^2}{x} \left(1 - \frac{1,86}{x^{1/2}} + \frac{1,48}{x^{3/2}} - \dots \right); \quad (14)$$

для этого же случая в [1] и [3] соответственно:

$$\sigma_c / \pi R^2 = 2,67\eta, \quad \sigma_c / \pi R^2 = 2,72\eta.$$

Отсюда видно, что оптическое приближение и результат Дроздова дают завышенную величину сечения (с относительной ошибкой порядка $\sim 0,6 x^{-1/2}$).

² По поводу формул (14) — (16) подчеркнем, что учет области переходных моментов несколько меняет ход сечений с энергией.

При больших эффективных поглощениях ($\eta > (x/2)^{1/2}$) из формул (9), (11) и (13) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_c}{\pi R^2} &= 1 + 1,66 \frac{\eta}{x} - 0,63 \frac{1}{\eta (x/2)^{1/2}} + \dots = \\ &= 1 + 0,83 \frac{\zeta y}{x} - 0,415 \frac{\zeta x}{y} - \frac{1,59}{\zeta y x^{1/2}} + \dots; \end{aligned} \quad (15)$$

в работах [1] и [3] $\sigma_c/\pi R^2 = 1$. Поправка к сечению поглощения в этом случае $\sim \eta/x$.

Как указывалось выше, для сечения рассеяния интересны результаты при малых эффективных поглощениях и преломлениях ($\eta \ll 1$, $\xi \ll 1$); из формул (8), (10) и (12) находим (см. примечание²):

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_s}{\pi R^2} &= 2(\xi^2 + \eta^2) \left(1 - \frac{1,86}{x^{1/2}} + \frac{0,865}{x^{3/2}} - \dots \right) = \\ &= \frac{y^4}{2x^2} (1 + \zeta^2) \left(1 - \frac{1,86}{x^{1/2}} + \frac{0,865}{x^{3/2}} - \dots \right), \end{aligned} \quad (16)$$

в то время как в [1]

$$\sigma_s/\pi R^2 = 2(\xi^2 + \eta^2).$$

Для наглядного представления о точности проведенных расчетов на рис. 3 приведены точные значения коэффициентов поглощения при параметрах $\xi = 1$, $\eta = 0,5$, $x = 10$, отмеченные точками, и значения коэффициентов поглощения, вычисленные с помощью приближенных формул (2) в области $l < x$, и (5) в области $l \sim x$ (сплошные кривые). Кроме того, в области $l \sim x$ показан ход коэффициентов поглощения, вычисленных по формуле (7), т. е. с учетом только первого члена в разложении (5) (пунктир). Из рис. 3 видно, что приближенные значения близки к точным. Хотя в области $l < x$ приближение дает лишь сглаженный ход коэффициентов поглощения, однако ошибки при вычислении сечений оказываются незначительными, ибо коэффициенты поглощения интегрируются по моментам (с весом $2l + 1$). Оценки показывают, что точность при вычислении сечений оказывается порядка 1–2%; таким образом, поправки к сечениям, полученным в оптическом приближении и в работе Дроздова, на порядок превышают ошибку вычислений. Отметим, что применяемые асимптотические выражения хорошо сшиваются (в среднем) в области $l \lesssim l_0$ (см. рис. 3; на рис. 1 и 2 область перекрытия асимптотик не показана).

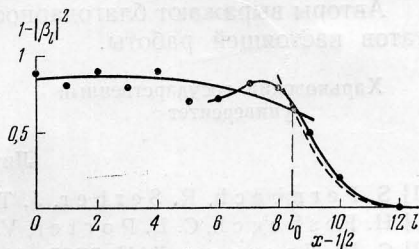


Рис. 3. Ход коэффициентов поглощения при параметрах $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 0,5$; точками отмечены точные значения, сплошные кривые получены с помощью формул (2) и (5), а пунктирная — с помощью приближенной формулы (7)

Заключение

Оценим энергии нейтронов, для которых применимы полученные результаты. Если для оценки верхнего предела исходить из предположения о том, что взаимодействие нейтрона с ядром как целым можно описывать моделью комплексного потенциала лишь при энергиях, для которых длина волны порядка или больше среднего расстояния между нуклонами в ядре, то этот предел находится в области энергий порядка сотен мегавольт. Кроме того, асимптотические формулы для цилиндрических функций, использованные в работе, справедливы лишь для достаточно больших аргументов ($x \ll 1$), что ограничивает применимость полученных результатов со стороны малых

энергий. Таким образом, результаты работы относятся к нейтронам с энергией $\sim 20-200$ MeV.

Заметим далее, что для правильного вычисления сечений в рамках модели комплексной потенциальной ямы необходимо учитывать, наряду с влиянием переходных моментов, также размытие ядерной границы. Учет обоих факторов произведен в работе Немировского [4]. Выполненная последним численная обработка формул, содержащих цилиндрические функции, позволила обойти трудности, связанные с аппроксимацией этих функций в области переходных моментов. Однако большое число приближений, сделанных в этой работе, затрудняет оценку точности полученных результатов.

Сравнение результатов настоящей работы с результатами Немировского показывает, что учет размытия ядерной границы всегда приводит к увеличению сечения поглощения, в то время как учет переходных моментов приводит к увеличению сечения при больших эффективных поглощениях и уменьшению — при малых. Таким образом, для энергий нейтронов порядка сотен мегавольт и малых ξ оба фактора действуют в противоположные стороны. Увеличение сечения поглощения за счет размытия ядерной границы (при размытии $\gtrsim k^{-1}$)³ порядка 10% (для тяжелых ядер) [4]. С другой стороны, выше было показано, что уменьшение сечения за счет правильного учета переходных моментов при резкой границе ядра такого же порядка. Следовательно, правильный учет области переходных моментов для энергий нейтронов порядка сотен мегавольт так же существенен, как и влияние размытости границы ядра.

Авторы выражают благодарность А. И. Ахиезеру за обсуждение результатов настоящей работы.

Харьковский государственный
университет

Поступила в редакцию
28 февраля 1958 г.

Литература

- [1] S. Fernbach, R. Serber, J. Taylor. Phys. Rev., **75**, 1362, 1949.
- [2] H. Feshbach, C. E. Porter, V. F. Weisskopf. Phys. Rev., **96**, 448, 1954.
- [3] С. И. Дроздов. ДАН СССР, **106**, 409, 1956.
- [4] П. Э. Немировский. ЖЭТФ, **30**, 551, 1956.
- [5] S. Pasternack, H. S. Snyder. Phys. Rev., **80**, 921, 1950.
- [6] М. И. Петрашень. Уч. Зап. ЛГУ, серия физич., **7**, 59, 1949.
- [7] Г. Н. Ватсон. Теория бесселевых функций, 1949.
- [8] В. А. Фок. Дифракция радиоволн вокруг земной поверхности, М.—Л., 1946.

ON THE THEORY OF INTERACTION BETWEEN FAST NEUTRONS POSSESSING VARIOUS ANGULAR MOMENTA ON SEMI-TRANSPARENT NUCLEI

L. E. Pargamanik, V. V. Ulyanov

The participation of fast neutrons with various angular momenta in the interaction with semi-transparent nuclei is studied within the framework of the complex square well nuclear model. The exact expressions for the partial cross sections are approximated with help of special asymptotic formulas for cylindrical functions which are valid throughout the complete angular momentum range. This approximation permits one to determine with greater precision the significance of waves with angular momenta $l \sim kR$ in neutron scattering and absorption processes as compared with the results derived in the quasi-classical approximation. Corrections to the integral absorption and scattering cross sections are obtained which are appreciable at high and low effective absorption.

³ Сравнение влияния области переходных моментов и размытия ядерной границы затрудняется отсутствием экспериментальных данных о величине области размытия для $E \gtrsim V$.

ON THE THEORY OF THE INTERACTION OF FAST NEUTRONS OF VARIOUS ANGULAR MOMENTA WITH SEMI-TRANSPARENT NUCLEI

L. E. PARGAMANIK and V. V. UL'IANOV

Khar'kov State University

Submitted to JETP editor February 28, 1958

J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) **35**, 258-264 (July, 1958)

*Дорогой Владимир
Владимирович не
нашли о гашении
растения.
25.05.85*

The participation of fast neutrons with various angular momenta in the interaction with semi-transparent nuclei is studied within the framework of the complex square-well model for the nucleus. The exact expressions for the partial cross sections are approximated with the help of special asymptotic formulas for the cylindrical functions which are valid throughout the momentum range of interest. This approximation allows a more precise determination of the participation of waves with angular momentum $l \sim kR$ in neutron scattering and absorption processes as compared with the results obtained in the quasi-classical approximation. Corrections to the integral absorption and scattering cross sections are obtained, which are important for high and low effective absorption.

IN many recent papers¹⁻⁴ on the scattering of particles from nuclei use is made of the model of a complex potential well. With this model it was possible to determine accurately the dependence of the cross section on energy in both the low- and high-energy regions. For small neutron energies only the wave with low angular momenta participate in the interactions with the nucleus. In the calculation of the cross section one can therefore sum directly over the partial cross sections.

For high neutron energies many waves (with momenta $l \lesssim kR$), interact with the nucleus, and for the calculation of the cross section it is necessary to sum over the whole contributing interval of momenta, and to determine accurately the upper limit of this interval. In addition, the diffuseness of the nuclear boundary also affects the value of the cross section.

Fernbach, Serber, and Taylor¹ regard the nucleus as a homogeneous sphere with a certain absorption coefficient and a certain refraction index. Applying a quasi-classical method based on an optical analogy (in the following we shall call this the optical approximation) to this model, it was possible to fit satisfactorily the neutron scattering experiments for energies of order 100 Mev. However, the differential scattering cross sections came out incorrectly. As shown by Paster-nack and Snyder,⁵ this discrepancy is for the most part due to the inaccuracy of the optical approximation, and not due to the model. The optical approximation gives the true partial cross sections only for waves with momenta $l \lesssim kR/2$. In

the region of momenta $l \lesssim kR$ the values for the partial cross sections appear to be too low, and waves with momenta $l > kR - \frac{1}{2}$ are not accounted for at all.

Drozdov³ obtained an expression for the absorption cross section for fast neutrons, solving the Schrödinger equation approximately with the help of the semi-classical method of Petrashen'.⁶ This paper improves on the results of the crude optical approximation, since the Petrashen' method gives good accuracy in the region $l < kR$; however, Drozdov applies without justification the formulas thus obtained also in the region $l \sim kR$ and cuts off the integration at the momentum $l = kR - \frac{1}{2}$, arguing that only waves with momentum corresponding to an impact parameter smaller than the nuclear radius participate in scattering and absorption processes.

Thus both methods^{1,3} give a good approximation only for partial waves with momenta $l < kR$. The momentum region $l \sim kR$ is treated incorrectly, and in the calculation of the cross section the integration is cut off at the momentum $l = kR - \frac{1}{2}$. It is therefore of interest to investigate in more detail the role of the momenta $l \sim kR$ in the interaction of neutrons with the nucleus, and to determine the behavior of the scattering and absorption coefficients in this momentum region. This paper treats this question on the basis of the simpler model of a complex square potential well. This well, for which the Schrödinger equation can be solved exactly, permits an estimate of the accuracy of the results obtained. In addition, the

effect of the diffuseness of the nuclear boundary is excluded.

1. REGION OF SMALL MOMENTA

With the model of a square complex potential well it is appropriate not to start from an approximate solution of the Schrödinger equation, but to obtain the exact expressions for the scattering and absorption coefficients. In summing these we use more exact approximations, taking account of all waves participating in the interaction.

If the interaction potential of the neutron-nucleus system has the form $U(r) = -V - iW$ for $r \leq R$ and $U(r) = 0$ for $r > R$, where R is the nuclear radius, the Schrödinger equation for the radial neutron wave function with momentum l and energy E can be solved exactly. The reflection coefficient has the form:

$$\beta_l = - \frac{x J_{l+1/2}(z) H_{l-1/2}^{(2)}(x) - z J_{l-1/2}(z) H_{l+1/2}^{(2)}(x)}{x J_{l+1/2}(z) H_{l-1/2}^{(1)}(x) - z J_{l-1/2}(z) H_{l+1/2}^{(1)}(x)}, \quad (1)$$

$$x = kR = \sqrt{2m} E^{1/2} R / \hbar, \quad z = \sqrt{2m} (E + V + iW)^{1/2} R / \hbar,$$

where m is the reduced mass of the neutron-nucleus system.

In order to get from (1) expressions for the coefficients of scattering, $|1 - \beta_l|^2$, and absorption, $1 - |\beta_l|^2$, which are convenient for inspection and for the integration over the whole contributing momentum interval, we have to use approximate formulas for the cylindrical functions. However, the usual formulas for $l \ll x$ and $l \sim x$ are applicable only in a rather narrow region of momenta: to those of order $x^{1/2}$ for small momenta, and to those below $x^{1/3}$ for $l \sim x$. Below we shall therefore use special formulas for the cylindrical functions in the region $l < x$ (see reference 7), and the formulas of Fock⁸ for the region $l \sim x$.

In the region $l < x$ the asymptotic formulas used, e.g. for the Bessel functions, have the form:

$$J_\nu(\nu \sec \beta) = \sqrt{\frac{2}{\pi \nu \tan \beta}} [\cos(\nu \tan \beta - \nu \beta) + O(1/\nu \tan \beta)].$$

The retention of only the first term in this expansion gives an error of order $1/3\nu \tan \beta$; in the momentum region $l < 3x/4$ this error does not surpass 5%. This approximation gives for the reflection coefficient the formula

$$\beta_l = \exp \left\{ 2i \left[\sqrt{z^2 - (l + 1/2)^2} - \sqrt{x^2 - (l + 1/2)^2} + (l + 1/2) \left(\cos^{-1} \frac{l + 1/2}{x} - \cos^{-1} \frac{l + 1/2}{z} \right) \right] \right\}, \quad (2)$$

which agrees with the result obtained by Drozdov.³

For high energies, where $\eta \equiv \text{Im } z \ll x$ and $\xi \equiv \text{Re } z - x \ll x$, the phase at infinity δ_l , which is related to the reflection coefficient by $\beta_l = e^{2i\delta_l}$, has the form:

$$\delta_l = (\xi + i\eta) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{l + 1/2}{x} \right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{l + 1/2}{x} \right)^4 - \dots \right] \approx (\xi + i\eta) \sqrt{1 - (l + 1/2)^2/x^2}.$$

In the optical approximation¹

$$\delta_l = [(n - 1)x + iKR/2] \sqrt{1 - (l + 1/2)^2/x^2}, \quad (3)$$

where K is the absorption coefficient, and n the refraction index. At high energies we have thus the following correspondence between the parameters: η corresponds to $KR/2$, and ξ corresponds to $(n - 1)x$. This enables us to compare the results of the optical approximation with ours. Since η depends not only on the imaginary part W of the potential, but also on the real part V , on the neutron energy, and on the mass of the nucleus, we shall in the following call this parameter the "effective absorption." Analogously, we shall call ξ the "effective refraction."

2. REGION OF INTERMEDIATE MOMENTA

Of special interest is the momentum region $l \sim x$. For an approximation of expression (1) in this momentum region we use the asymptotic formulas for the cylindrical functions of Fock.⁸ For example, for the Bessel function we have:

$$J_{l+1/2}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{2} \right)^{-1/2} \times \left\{ v(\tau) - \frac{1}{60} \left(\frac{z}{2} \right)^{-1/2} [\tau^2 v'(\tau) + 4\tau v(\tau)] + \dots \right\}. \quad (4)$$

With the help of these formulas the reflection coefficient takes the form

$$\beta_l = \frac{xv(\tau)w^*(t') - zv(\tau')w^*(t)}{xv(\tau)w(t') - zv(\tau')w(t)}, \quad (5)$$

where

$$w(t) = \sqrt{\pi/3} e^{2\pi i/3} (-t)^{1/2} H_{1/2}^{(1)}[2/3(-t)^{1/2}] = u(t) + iv(t),$$

$$w^*(t) = u(t) - iv(t),$$

$$t = (l + 1/2 - x)/(x/2)^{1/2}, \quad t' = (l - 1/2 - x)/(x/2)^{1/2},$$

$$\tau = (l + 1/2 - z)/(z/2)^{1/2}, \quad \tau' = (l - 1/2 - z)/(z/2)^{1/2}.$$

In formula (5) we retain only the first terms of expansion (4). This approximation introduces an error of order $|t|^{5/2}/60(x/2)^{2/3}$; in the region of momenta $|l - x| \lesssim x^{1/2}$ this error does not surpass 2%. Hence formula (2) gives a good approximation for the reflection coefficient in the region $l < x$, while formula (5) applies to the region $l \sim x$. Thus the whole contributing mo-

momentum interval is covered.

We calculate the scattering and absorption coefficients with the help of formula (5) and expand the resulting expression in powers of $(x/2)^{1/2}$. We obtain:

$$|1 - \beta_l|^2 = 4(\xi^2 + \eta^2) \frac{[v'(t)^2 - tv(t)^2]^2}{(x/2)^{1/2}}, \quad (6)$$

$$1 - |\beta_l|^2 = 4\eta \frac{v'(t)^2 - tv(t)^2}{(x/2)^{1/2}}. \quad (7)$$

In going from negative to positive values of the argument, the Airy function $v(t)$ changes from an oscillating function to an exponentially decreasing function. Therefore the scattering and absorption coefficients decrease rapidly after some characteristic value $l_0 \sim x - 1/2$. However, l_0 does not in general equal $x - 1/2$: for absorption coefficients with high effective absorption ($\eta > (x/2)^{1/3}$) $l_0 \approx x - 1/2$, for those with low effective absorption ($\eta \ll 1$) $l_0 < x - 1/2$. It was found that the waves with momentum $l > x - 1/2$ contribute significantly to the absorption cross section for high effective absorption (see Fig. 1): their inclusion gives a correction of order 20% at relatively low energies ($x \sim 10$, $\eta \sim 2$). For small effective absorption ($\eta \ll 1$) the partial cross sections begin to decrease rapidly already for $l < x - 1/2$ (see Fig. 2), so that the approximations of references 2 and 3 give these incorrectly in the region $l \lesssim x$. As a result, these approximations yield too high values for the cross section (of order 20% for $x \sim 10$). It was found that the region $l > x - 1/2$ contributes

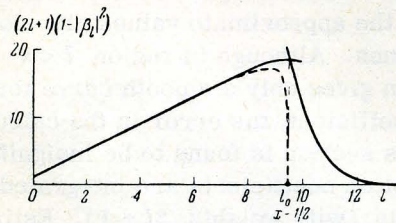


FIG. 1. Partial absorption cross sections for the parameters $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 1.875$; the solid curves are obtained with formulas (2) and (7), the dotted curve is obtained with the optical approximation (3).

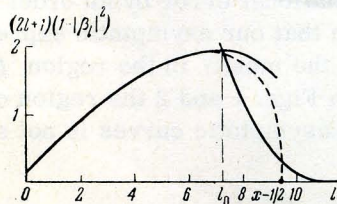


FIG. 2. Partial absorption cross sections for the parameters $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 0.05$; the solid curves are obtained with formulas (2) and (7), the dotted curve is obtained with the optical approximation (3).

nothing to the partial cross sections for all conceivable values of the effective absorption and refraction. A comparison is possible only with the optical approximation, since Drozdov³ investigated only the absorption of neutrons. We shall show below that our results differ from those of the optical approximation only for small effective absorption and refraction. The optical approximation gives somewhat larger values in this case.

3. CROSS SECTIONS FOR SCATTERING AND ABSORPTION

With the approximations obtained for the coefficients of reflection, scattering, and absorption it is possible to calculate the cross sections by integrating* over the whole momentum interval (separately for $l \leq l_0$ and for $l \geq l_0$). Integrating, we obtain:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_s}{\pi R^2} &= \int_0^\infty (2l+1) |1 - \beta_l|^2 dl = \left[1 + \frac{t_0}{(x/2)^{1/2}} + \dots \right] \\ &\times \left\{ 1 + e^{-4\eta} [1 + \eta + \dots] - 2e^{-2\eta} \left[\cos 2\xi \left(1 + \frac{\eta}{2} + \dots \right) \right. \right. \\ &\left. \left. + \sin 2\xi \left(\frac{\xi}{2} + \dots \right) \right] \right\} + \frac{4(\xi^2 + \eta^2)}{(x/2)^{1/2}} (0.011 - 0.044t_0 + \dots), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_c}{\pi R^2} &= \int_0^\infty (2l+1) (1 - |\beta_l|^2) dl = \left[1 + \frac{t_0}{(x/2)^{1/2}} + \dots \right] \\ &\times \left\{ 1 - e^{-4\eta} [1 + \eta + \dots] + \frac{8\eta}{x} [0.096 - 0.21t_0 + \dots] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

where t_0 is related to the characteristic l_0 by

$$t_0 = (l_0 + 1/2 - x) / (x/2)^{1/2},$$

and is separately determined, for the scattering coefficient from the identification of the expression $|1 - \beta_l|^2$ in formulas (2) and (6), and for the absorption coefficient from the identification of the expression $1 - |\beta_l|^2$ in formulas (2) and (7). For example, for $\eta \ll 1$ and $\xi \ll 1$, t_0 is the same for the scattering and for the absorption, and has the form

$$t_0 = 0.685 - 1.315(x/2)^{1/2} + 0.1/(x/2)^{1/2} - \dots, \quad (10)$$

while, for large η , t_0 for the absorption is

$$t_0 = 0.53 - 0.63(x/2)^{1/2}/\eta + \dots \quad (11)$$

For comparison with the results of the optical approximation and with the approximation of Drozdov, we consider formulas (8) and (9) for,

*The relative error introduced by changing the summation over the partial scattering and absorption cross sections (to be performed in the calculation of the cross section) into an integration is very small ($\sim x^{-2}$) and can be neglected.

the cross sections, expressed in terms of the effective absorption η and the effective refraction ξ , in the limiting cases. Depending on the relation between the neutron energy and the parameters of the potential well the expressions for η and ξ have the following form:

for $W < V < E$ ($x > y$, $\zeta < 1$):

$$\begin{aligned}\eta &= \sqrt{\frac{mR^2}{2\hbar^2 E}} W \left(1 - \frac{V}{2E} + \dots\right) = \frac{\zeta y^2}{2x} \left(1 - \frac{y^2}{2x^2} + \dots\right), \\ \xi &= \sqrt{\frac{mR^2}{2\hbar^2 E}} V \left(1 - \frac{V}{4E} + \dots\right) \\ &= \frac{y^2}{2x} \left(1 - \frac{(1-\zeta^2)y^2}{4x^2} + \dots\right);\end{aligned}\quad (12)$$

for $W < E < V$ ($\xi y^2 < x^2 < y^2$):

$$\begin{aligned}\eta &= \sqrt{\frac{mR^2 V}{2\hbar^2}} W \left(1 - \frac{E}{2V} + \dots\right) = \frac{\zeta y}{2} \left(1 - \frac{x^2}{2y^2} + \dots\right), \\ \xi &= \sqrt{\frac{2mR^2 V}{\hbar^2}} \left(1 - \sqrt{\frac{E}{V}} + \frac{E}{2V} - \dots\right) \\ &= y \left(1 - \frac{x}{y} + \frac{x^2}{2y^2} - \dots\right),\end{aligned}\quad (13)$$

where

$$y = \sqrt{2m} V^{1/2} R / \hbar, \quad \zeta = W / V.$$

For small effective absorption ($\eta \ll 1$) we obtain from (9), (10), and (12):*

$$\begin{aligned}\frac{\sigma_c}{\pi R^2} &= 2.72\eta \left(1 - \frac{1.86}{x^{1/2}} + \frac{1.48}{x^{3/2}} - \dots\right) \\ &= 1.36 \frac{\zeta y^2}{x} \left(1 - \frac{1.86}{x^{1/2}} + \frac{1.48}{x^{3/2}} - \dots\right);\end{aligned}\quad (14)$$

in the same case references 1 and 3 give, respectively:

$$\sigma_c / \pi R^2 = 2.67\eta, \quad \sigma_c / \pi R^2 = 2.72\eta.$$

We see that the optical approximation and Drozdov's results give too large values for the cross section (with a relative error of order $-0.6x^{-1/2}$).

For large effective absorption ($\eta > (x/2)^{1/3}$) we obtain from (9), (11), and (13):

$$\begin{aligned}\frac{\sigma_c}{\pi R^2} &= 1 + 1.66 \frac{\eta}{x} - 0.63 \frac{1}{\eta(x/2)^{1/2}} + \dots \\ &= 1 + 0.83 \frac{\zeta y}{x} - 0.415 \frac{\zeta x}{y} - \frac{1.59}{\zeta y x^{1/2}} + \dots;\end{aligned}\quad (15)$$

in references 1 and 2 $\sigma_c / \pi R^2 = 1$. The correction to the absorption cross section is in this case $\sim \eta/x$.

As mentioned above, for the scattering cross section we are interested in the results for small

effective absorption and refraction ($\eta \ll 1$, $\xi \ll 1$); we find from (8), (10), and (12) (see footnote*):

$$\begin{aligned}\frac{\sigma_s}{\pi R^2} &= 2(\xi^2 + \eta^2) \left(1 - \frac{1.86}{x^{1/2}} + \frac{0.865}{x^{3/2}} - \dots\right) \\ &= \frac{y^4}{2x^2} (1 + \zeta^2) \left(1 - \frac{1.86}{x^{1/2}} + \frac{0.865}{x^{3/2}} - \dots\right),\end{aligned}\quad (16)$$

while reference 1 gives

$$\sigma_s / \pi R^2 = 2(\xi^2 + \eta^2).$$

For a graphical illustration of the accuracy of the above calculations see Fig. 3. The points represent the exact values of the absorption coefficient for the parameters $\xi = 1$, $\eta = 0.5$, $x = 10$;

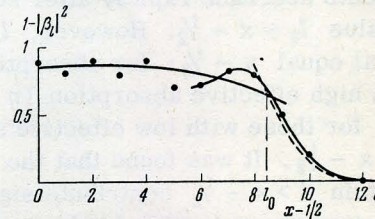


FIG. 3. Absorption coefficients for the parameters $x = 10$, $\xi = 1$, $\eta = 0.5$; the points denote the exact values, the solid curves are obtained with the formulas (2) and (5), the dotted curve is obtained with the approximate formula (7).

the solid curve represents the values of the absorption coefficient calculated with the approximate formulas (2) in the region $l < x$, and (5) in the region $l \sim x$. In addition, in the region $l \sim x$ the dotted curve represents the absorption coefficient calculated with formula (7), i.e., retaining only the first term in expansion (5). We see from Fig. 3 that the approximate values are close to the exact ones. Although in region $l < x$ the approximation gives only a smooth curve for the absorption coefficient, the error in the calculation of the cross section is found to be insignificant. The absorption coefficients are integrated over the momenta (with weights $2l + 1$). Estimates show that the accuracy of the cross section calculations is on the order of 1 or 2%; thus the corrections to the cross sections obtained with the optical approximation and by Drozdov are greater than the calculational error by an order of magnitude. We note that our asymptotic expressions tally well (in the mean) in the region $l \lesssim l_0$ (see Fig. 3; in Figs. 1 and 2 the region of overlapping of the asymptotic curves is not shown).

CONCLUSION

Let us estimate the neutron energies for which the above results are valid. We base our estimate of the upper limit on the assumption that the neu-

*We emphasize in relation to formulas (14) to (16) that the inclusion of the region of intermediate momenta changes somewhat the dependence of the cross sections on energy.

tron-nucleus interaction can be summarily described with the model of a complex potential only for energies corresponding to a wavelength of the same order or larger than the average distance between the nucleons in the nucleus. Then this limit is in the region of energies of order 100 Mev. In addition, the asymptotic formulas for the cylindrical functions used in this paper are valid only for sufficiently large arguments ($x \ll 1$). This limits the applicability of the above results at the low energy side. Our results refer thus to energies of 20 to 200 Mev.

We note further that for an accurate calculation of the cross sections in the framework of the complex potential well model one must, together with the effect of the intermediate momenta, also consider the effect of the diffuseness of the nuclear boundary. Both effects are included in the paper of Nemirovskii.⁴ His numerical treatment of the formulas containing the cylindrical functions allows him to circumvent the difficulties connected with the approximation of these functions in the region of intermediate momenta. However, the great number of approximations in his paper makes it difficult to estimate the accuracy of his results.

The comparison of the results of the present paper with the results of Nemirovskii shows that the consideration of the diffuseness of the nuclear boundary always leads to an increase in the absorption cross section, while the inclusion of the intermediate momenta leads to an increase in the cross section for large effective absorption, but to a decrease for small effective absorption. Hence, for neutron energies of order 100 Mev and small ξ the two effects work in opposite directions. The increase of the cross section due to the diffuseness of the nuclear boundary (for diffuseness $\approx k^{-1}$)* is of order 10% (for

heavy nuclei).⁴ On the other hand, we have shown above that the decrease in the cross section due to the proper inclusion of the intermediate momenta for a nucleus with sharp boundary is of the same order of magnitude. As a result, the proper inclusion of the region of intermediate momenta for neutron energies of order 100 Mev is just as essential as the consideration of the effects of the diffuseness of the nuclear boundary.

The authors express their gratitude to A. I. Akhiezer for a discussion of the results of this paper.

¹ Fernbach, Serber, and Taylor, Phys. Rev. **75**, 1352 (1949).

² Feshbach, Porter, and Weisskopf, Phys. Rev. **96**, 448 (1954).

³ S. I. Drozdov, Dokl. Akad. Nauk SSSR **106**, 409 (1956), Soviet Phys. "Doklady" **1**, 37 (1956).

⁴ P. E. Nemirovskii, J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) **30**, 551 (1956); Soviet Phys. JETP **3**, 484 (1956).

⁵ S. Pasternack and H. S. Snyder, Phys. Rev. **80**, 921 (1950).

⁶ M. I. Petrashen', Uch. Zap. LGU, seriia fizich. **7**, 59 (1949).

⁷ G. N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, Cambridge, 1945.

⁸ V. A. Fock, Дифракция радиоволн вокруг земной поверхности (Diffraction of Radio Waves on the Surface of the Earth) M.—L., 1946.

*The comparison of the effects of the region of intermediate momenta and of the diffuseness of the nuclear boundary is made difficult by the absence of experimental data on the diffuseness parameter for $E \gtrsim V$.

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ УССР
ХАРЬКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А. М. ГОРЬКОГО

УЛЬЯНОВ
Владимир Владимирович

На правах рукописи

ОСОБЕННОСТИ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКОГО ДВИЖЕНИЯ
В РЕЗКО ИЗМЕНЯЮЩИХСЯ ПОЛЯХ

(01.04.02 - теоретическая и математическая физика)

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Харьков - 1975

Работа выполнена в Харьковском ордена Трудового Красного
Знамени государственном университете им.А.М.Горького

Научный руководитель — академик И.М.ЛИФИЦ.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор Г.Е.ЗИЛЬБЕРМАН,
кандидат физико-математических наук В.И.ГЕРАСИМЕНКО.

Ведущее научно-исследовательское учреждение —
физико-технический институт низких температур АН УССР
(г.Харьков).

Автореферат разослан " апреля 1975 г.
Защита диссертации состоится " 16 " мая 1975 г.
в 14.00 часов на заседании Ученого совета физического
факультета Харьковского госуниверситета (г.Харьков — 77,
пл.Дзержинского, 4, Новая физическая аудитория).

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в
библиотеке университета.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ СОВЕТА

Квантовомеханическое движение частицы с энергией вблизи значений потенциала в сингулярных точках типа максимумов, изломов и т.п. характеризуется рядом особых свойств. Например, время движения волновых пакетов может существенно отличаться от классического времени движения в окрестности классически недостижимых точек поворота, а правила квантования для потенциальной ямы с граничными или внутренними особенностями приводят к энергетическому спектру, в котором не выполняется обычное соотношение для расстояния между соседними уровнями энергии и классической частотой колебаний $\Delta E = \hbar \omega_{кл}$.

В работах /1-3/ исследовался энергетический спектр в случае особенностей потенциальной энергии типа максимума внутри потенциальной ямы (или эквивалентная задача в пространстве импульсов при движении частицы с произвольным законом дисперсии в магнитном поле вблизи траекторий с самопересечением).

Представляет интерес рассмотреть влияние различных особенностей эффективной потенциальной энергии (прежде всего, степенных) на структуру энергетического спектра в потенциальных ямах с граничными (например, у эффективного потенциала, используемого при изучении квантовых размерных эффектов) и внутренними особенностями /4/, на отражение от границ движения, на рассеяние частиц /5/. Все эти вопросы, а также свойства квазиуровней в потенциальных ловушках, резонансов при рассеянии цепочкой особенностей и энергетических зон в ограниченном периодическом потенциальном поле составляют предмет исследования в диссертационной работе.

В реферируемой диссертации проведен теоретический анализ особых свойств тех ветвей квантовомеханического движения физических систем, которые моделируются эффективными потенциалами с резким пространственным изменением. При постановке задачи

указывается на важность изучения движения в потенциальных полях с особенностями для применения в теории размерного квантования, магнитных и поверхностных свойств, в электронной теории металлов и в ядерной физике. Особый интерес к этим вопросам вызван развитием теоретических и экспериментальных работ по квантовым размерным эффектам и поверхностным явлениям, а также зонной теории электронного энергетического спектра и резонансной прозрачности периодических сред.

Хотя теория размерного квантования интенсивно разрабатывается, существует ряд нерешённых вопросов влияния различных факторов на ограниченные системы, в частности, строения границы металла. Начало теоретическому изучению квантовых размерных эффектов (КРЭ) положено в нашей стране работами Лифшица и Косевича /6/. Последовательный квантовомеханический учёт граничных влияний представляет собой сложную и трудную даже в своей постановке задачу. Существует лишь ряд модельных подходов, заключающихся во введении потенциальных полей с достаточно резким изменением вблизи границ или некоторых граничных условий. В ряде работ рассматривалось влияние размерного квантования энергии на термодинамические свойства электронов проводимости металла без учёта деталей строения границ и без магнитного поля /7/, исследовались КРЭ в магнитном поле /8/, учитывалась граничная структура в модели прямоугольной потенциальной ямы /9/ и в моделях со случайно изменяющимися параметрами /10, 11/ (ссылки на другие работы по КРЭ см., например, в /12/). В диссертации предложены и исследованы модели строения границы металла, характеризующиеся специальной "функцией размытия". Рассчитана плотность электронных состояний в слое металла, определяющая термодинамические свойства электронов проводимости. При этом учёт размытия границы металла существ -

венно изменяет поверхностные величины, а осциллирующие изменяются незначительно.

Так как вдали от мест резкого изменения потенциала движение происходит под действием плавно изменяющихся сил, возможно решение целого комплекса задач теории рассеяния, связанных и квазисвязанных состояний единым подходом, сочетающим локальные точные квантовомеханические решения с квазиклассическим приближением. Такой подход разработан в диссертации /4/ и служит основой проведенного исследования. С его помощью выполнен анализ структуры энергетического спектра и рассеяния в критическом диапазоне энергий, где по классическим представлениям происходит резкий переход от режима движения с полным отражением к режиму с полной прозрачностью, а квантовая картина даёт плавный переход от слабой прозрачности к небольшому отражению. К этой же проблеме относятся и рассмотренные в диссертации свойства потенциальных ловушек и резонансного рассеяния периодической средой, где в критическом диапазоне энергий сохраняются резонансный характер рассеяния и метастабильность квазистационарных состояний. Найдены формулы, определяющие зависимость ширины квазиуровней от основных параметров — квантовой частоты и прозрачности отдельного потенциального барьера. Сформулированы условия существования квазиуровней и зон в критическом диапазоне энергий для случая степенной координатной зависимости потенциала вблизи вершин барьеров. Кроме того, получены правила квантования и закон дисперсии для зонной части энергетического спектра и граничные (таммовские) ветви энергии в периодическом потенциальном поле с произвольными граничными условиями. При этом развитый в диссертации метод позволил вывести уравнение, определяющее зонные и граничные уровни энергии в их взаимосвязи.

Одновременно в работе делается также попытка обобщения различных квазиклассических результатов в особых случаях, когда одно лишь квазиклассическое приближение не даёт решения. В современных применениях квантовой механики квазиклассический метод занимает одно из ведущих мест, так как во многих случаях условия движения оказываются близкими к классическим, если не во всей области пространства, то, по крайней мере, в некоторой его части. Квазиклассический метод позволяет развить единые способы решения целого ряда задач в широком диапазоне параметров (энергий, потенциалов) и допускает наглядную интерпретацию (пакетное движение, средние траектории, локализация частиц). В то же время этот метод даёт основные квантовые эффекты как в области инфинитных движений (надбарьерное отражение, подбарьерное туннелирование, квазиуровни), так и в области связанных состояний (дискретность энергетического спектра, зонная структура). При этом применение даже первого квазиклассического приближения обеспечивает высокую точность /13/.

Сочетание квазиклассического приближения вне особых точек потенциальной энергии с точным квантовомеханическим расчётом вблизи таких точек приводит к новым чертам квазиклассического описания. Например, в области дискретного спектра энергии возникает особое поведение плотности состояний, когда классические точки поворота близки к особым точкам самой потенциальной энергии или движение совершается с энергией вблизи наибольшего значения потенциала.

В случае потенциальных полей с простыми аналитическими свойствами в квазиклассическом методе используют обычно аналитическое продолжение в область комплексных значений пространственных координат /14-16/ - строгий и изящный способ. Если же рассматриваются модели потенциала с резким изменением

(скачки, изломы и т.п.), то можно применять метод непосредственного рассмотрения решений вблизи таких точек в сочетании с квазиклассическим описанием вдали от них. При этом не теряется наглядность всех величин при сохранении достаточно простого математического аппарата и расширении приложений квазиклассического приближения к большому кругу задач.

В диссертационной работе под особенностями понимаются окрестности особых точек потенциальной энергии (изломы, заострения, скачки, максимумы, наибольшие значения потенциала, δ -всплески и т.п.), а также окрестности классических точек поворота. Критическому диапазону энергий соответствует сближение классических точек поворота с особыми точками потенциала, а критической энергии — их слияние (например, критическое значение энергии соответствует наибольшему значению потенциального барьера, в частности, максимуму).

Движение частицы квазиклассично вдали от особенностей, а вблизи особых точек неклассично, но эта неклассичность накладывает отпечаток на характер квазиклассического движения (фазу волновой функции стационарного состояния, время отражения пакета для нестационарного движения, плотность энергетического спектра, неполовинный характер правил квантования, критическое над- и подбарьерное отражение, особенности чередования ветвей энергетического спектра в двух потенциальных ямках, разделяемых особенностью, характер зонной структуры).

В случае резкого изменения потенциала нарушается обычное квазиклассическое соотношение для расстояния между соседними уровнями энергии дискретного спектра и классической частотой колебаний. Оказывается, что это соотношение переходит в новое, содержащее характерную частоту колебаний пакета стационарных состояний, введенную в диссертации и названную "квантовой" частотой /4/.

На основе интегрального уравнения, соответствующего уравнению Шредингера для стационарных состояний, в работе развит специальный метод теории возмущений в околоритической области энергий и при больших энергиях.

В реферируемой работе рассмотрены одномерные задачи, однако они фактически являются некоторыми независимыми ветвями движения сложных систем — следствие разделения переменных (точного или приближенного) в реальных системах с большим числом степеней свободы.

В диссертационной работе проводится выявление связей различных мер движения (финитных, инфинитных, стационарных, нестационарных) на уровне общих соотношений, затем идут расчёты для конкретных типов особенностей потенциальной энергии и обсуждаются применения. Некоторые результаты являются точными, но в большинстве случаев расчёты ведутся в обычном (первом) квазиклассическом приближении в сочетании с локальным использованием точного квантовомеханического расчёта и различных вариантов теории возмущений, что даёт решение целого комплекса задач связанных, квазисвязанных состояний и рассеяния, объединяя их единой схемой и выделяя внутренние соотношения между их характеристиками. Окончательные формулы выражаются через небольшое число параметров с непосредственным физическим смыслом (коэффициенты прозрачности отдельных барьеров, локальные квазиуровни, квантовые частоты пакетного движения).

Отметим некоторые конкретные результаты, полученные в диссертации.

Вдали от классической точки поворота, в классически доступной области, волновая функция стационарного состояния финитного или полуфинитного движения частицы в обычном квазиклассическом приближении, как известно /17/, может быть записана в ви-

где $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int^x k dx - \alpha\right)$, где $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$,

E - полная энергия, m - масса, U - потенциальная энергия, ℓ - левая точка поворота, α - левая граничная фаза. Аналогично для правой точки поворота.

Вблизи критической энергии, соответствующей значению потенциала в особой точке, α принимает различные значения в зависимости от энергии и вида особенности. Изменение α с энергией определяет время отражения пакета стационарных состояний - "квантовое" время отражения $t_{\kappa\beta} = t_{\kappa\ell} - 2\hbar \frac{d\alpha}{dE}$, где $t_{\kappa\ell}$ - классическое время движения до точки поворота и назад. Для степенной особенности $U(x) = -\beta x^\ell$ при $x > 0$ граничная фаза при критической энергии $E = 0$ оказывается равной

$$\alpha(0) = \frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi}{2(\ell+2)}, \quad (I)$$

где верхний знак соответствует условию непроницаемости границы $\psi(0) = 0$, а нижний - граничному условию $\psi'(0) = 0$. В диссертации вычислены также значения граничной фазы в критическом диапазоне энергий $|E| \lesssim \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{\ell}{\ell+2}} \beta^{\frac{2}{\ell+2}}$.

При движении частицы в одномерной потенциальной яме с граничными особенностями в правилах квантования $\oint k dx = 2\pi(n + \gamma)$ величина γ выражается через левую α_ℓ и правую α_n граничные фазы: $\gamma = \frac{\alpha_\ell + \alpha_n}{\pi}$, - так что в критическом диапазоне энергий спектр перестраивается по сравнению с правилом $\Delta E = \hbar \omega_{\kappa\ell}$, так как плотность уровней энергии при этом определяется пакетным периодом колебаний $\tau_{\kappa\beta} = \hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\kappa\ell} - 2\hbar \frac{d}{dE}(\alpha_\ell + \alpha_n)$, а расстояние между соседними уровнями энергии $\Delta E = \hbar \omega_{\kappa\beta}$, $\omega_{\kappa\beta} = \frac{2\pi}{\tau_{\kappa\beta}}$. При этом квантовая добавка $-2\hbar \frac{d\alpha}{dE}$ в случае классически недостижимых точек поворота (для степенной особенности с $\ell \geq 2$) компенсирует расходимость классического времени отражения и плотности состояний, а в

случае классически достижимых ($\ell < 2$) - сглаживает их особенности.

Расчёты для линейных и квадратичных потенциалов проведены сшиванием точных решений в интервале степенного хода (функций Эйри и параболического цилиндра) с квазиклассическими для всех энергий; для других же показателей степени ℓ точное решение (функции Ганкеля) получается лишь при критическом значении энергии, отклонение от которого рассматривается как возмущение.

Граничными особенностями обладают также модели потенциала, применяемые при изучении поверхностных свойств и КРЭ. На примере электронов с квадратичным законом дисперсии в слое металла иллюстрируется, какие изменения вносит учёт строения границы уже в простых потенциальных моделях.

В диссертации правила квантования энергии электрона, относящейся к перпендикулярному слою металла направлению, для дискретной части спектра с учётом размытия границ предлагается записать /18/ следующим образом:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} [n - \gamma_*(E_1)]^2, \quad n=1, 2, \dots, n_{\max}, \quad (2)$$

где ℓ - толщина слоя атомных остатков, m - эффективная масса электрона, а "функция размытия" γ_* учитывает отклонение условия квантования от случая модели непроницаемых стенок с $\gamma_* = 0$. Вычисление энергетической плотности состояний на единицу объёма даёт

$$V(E) = V_0(E) \left\{ 1 - \frac{\pi}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} [1 - 2\gamma_*(E)] + \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\sin[2\pi s n(E)]}{s} \right\}, \quad (3)$$

где $V_0(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$ - плотность состояний в неограни-

ниченном случае $1/1$, а $n(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\pi \hbar} + \gamma_*(E)$. В качестве примера расчёта с помощью выражения (3) приводится $1/18/$ результат для теплоёмкости вырожденного электронного газа. При этом поверхностные величины существенно зависят от γ_* , а осциллирующие — слабо. Аналогичные результаты получаются и для квантовых цилиндров.

В случае внутренних особенностей, когда по одну сторону особенности, вдали от особых точек, в классически доступной области движения, волновая функция переходит в $\psi_1(x) = \frac{C_1}{\sqrt{\kappa}} \exp(i \int_{\xi_0}^x \kappa dx) + \frac{D_1}{\sqrt{\kappa}} \exp(-i \int_{\xi_0}^x \kappa dx)$, а по другую — в $\psi_2(x) = \frac{C_2}{\sqrt{\kappa}} \exp(i \int_{\xi_2}^x \kappa dx) + \frac{D_2}{\sqrt{\kappa}} \exp(-i \int_{\xi_2}^x \kappa dx)$, где ξ — соответствующие точки поворота, удобно ввести оператор \hat{G} перехода через особенность $1/4/$ по правилу $\begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix}$. Матричные элементы этого оператора связаны между собой соотношениями $G_{11}^* = G_{22}$, $G_{12}^* = G_{21}$, $\det \hat{G} = |G_{22}|^2 / |G_{11}|^2 = 1$ и могут быть записаны с выделением модулей и фаз в виде

$$G_{21} = |G_{21}| \exp(i \int_{\xi_0}^{\xi_2} \kappa dx + i \varphi_{21}), \quad G_{22} = |G_{22}| \exp(-i \int_{\xi_0}^{\xi_2} \kappa dx + i \varphi_{22}).$$

Использование G -оператора позволяет достаточно просто $1/4/$ получить правила квантования в потенциальной яме с внутренней особенностью, обобщающие результаты для случая максимума потенциала, рассмотренного впервые в работах $1/2, 3/$. В диссертации подробно исследуется структура энергетического спектра при различных внутренних особенностях в критическом диапазоне энергий.

Абсолютные величины матричных элементов оператора перехода через барьер-особенность определяют коэффициенты прозрачности $T = |G_{22}|^{-2} = (1 + |G_{21}|^2)^{-1}$ и отражения $R = |G_{21}|^2 (1 + |G_{21}|^2)^{-1}$ при рассеянии на барьере, а фазы — пакетное время отражения и прохождения (например, $\tau_{\text{прох}} =$

$= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{d\varphi_2}{dx} \right)$. Так, для несимметричного одностепенного /5/ потенциального барьера $U(x) = -|x|^\ell \begin{cases} \beta_2, & x > 0, \\ \beta_1, & x < 0, \end{cases}$ в околоскритической области энергий $|\lambda| \ll 1$

$$T = T(0) \left[1 + (\lambda_1 + \lambda_2 + 2\sqrt{\lambda_1 \lambda_2} \cos \frac{2\pi}{\ell+2}) \frac{\sin \frac{\pi}{\ell+2}}{\pi (\ell+2)^{\frac{1}{\ell+2}}} \frac{\Gamma(\frac{\ell+1}{2})}{\Gamma_4} + O(\lambda^2) \right], \quad (4)$$

где при критической энергии

$$T(0) = \frac{4(\beta_1 \beta_2)^{\frac{1}{\ell+2}}}{(\beta_1^{\frac{1}{\ell+2}} + \beta_2^{\frac{1}{\ell+2}})^2} \left(\sin \frac{\pi}{\ell+2} \right)^2, \quad (5)$$

безразмерная энергия $\lambda = E \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{\ell}{\ell+2}} \beta^{-\frac{2}{\ell+2}}$, $\Gamma_n \equiv \Gamma\left(\frac{n}{\ell+2}\right)$ - гамма-функция. При больших же энергиях $\lambda \gg 1$ коэффициент отражения для таких барьеров убывает с ростом энергии по степенному закону:

$$R = \frac{1}{E^{\ell+2}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^\ell \frac{\Gamma^2(\ell+1)}{4^{\ell+2}} (\beta_1^2 + \beta_2^2 - 2\beta_1 \beta_2 \cos \pi \ell). \quad (6)$$

Более детально при всех энергиях исследуются также квадратичные и линейные барьеры как симметричные, так и несимметричные.

Полученные результаты для рассеяния служат основой интерпретации особых свойств зонного энергетического спектра периодического потенциала /21/, квазиуровней в ловушках /19/, а также при исследовании резонансного рассеяния цепочкой особенностей /24/. Например, в односторонней ловушке /20/ (одномерной потенциальной яме, отделённой барьером от области инфинитного движения частицы в одном направлении) отношение I квадратов амплитуд волновой функции стационарного состояния в обычном квазиклассическом приближении в яме и вне её, а в двусторон-

ней ловушке (потенциальной яме между двумя одинаковыми последовательно или симметрично расположенными барьерами) коэффициент прозрачности T_2 имеет резонансный характер:

$$I = \frac{1+\sqrt{R}}{1-\sqrt{R}} \left[1 + \sqrt{R} \left(\frac{\sin \varepsilon}{1-\sqrt{R}} \right)^2 \right]^{-1}, \quad T_2 = \left[1 + 4R \left(\frac{\sin \varepsilon}{T} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (7)$$

где $\varepsilon = \int \kappa dx - \pi n - \phi$ (n - целое число) с интегралом, взятым между точками поворота в яме при $E < 0$, а при $E > 0$ - между точкой поворота в яме и точкой вершины барьера для односторонней ловушки и точками вершин барьеров для двусторонней. При этом, например, для односторонней ловушки $\phi = \alpha + \frac{1}{2}(\varphi_2 + \pi - \varphi_1)$. Максимум I и T_2 достигается при $\varepsilon = 0$, что дает квазиуровни E_n , энергетическая плотность которых определяется "квантовым" периодом колебаний отражаемой части пакета стационарных состояний $\tau = \hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{cl} - 2\hbar \frac{d\phi}{dE}$ с соответствующими ϕ , τ_{cl} - классический период колебаний, а расстояние между квазиуровнями - "квантовой" частотой ω : $\Delta E = \hbar \omega$, $\omega = \frac{2\pi}{\tau}$. Вычисления приводят к следующим выражениям для ширины γ квазиуровней ($E_n \pm \gamma$) в односторонней (индекс 1) и двусторонней (индекс 2) ловушках: $\gamma_1 = \frac{\hbar \omega}{2\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R}}$, $\gamma_2 = \frac{\hbar \omega}{\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R}}$. Например, для степенных симметричных "шапок" барьеров $U(x) = -\beta/|x|^\ell$ с достаточно большими размерами X , так что $Z = X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{\ell+2}} \gg 1$, вблизи критической энергии для двусторонней ловушки

$$T_2 = \left[1 + 4 \left(\cos \frac{\pi}{\ell+2} \right)^2 \left(\sin \frac{\pi}{\ell+2} \right)^{-2} \sin^2 \varepsilon \right]^{-1}, \quad (8)$$

$$\varepsilon = \pi \frac{E - E_n}{\hbar \omega_0}, \quad \gamma_2 = \frac{\hbar \omega_0}{\pi} \ln \sec \frac{\pi}{\ell+2}.$$

Так, при $\ell=2$ (простой максимум в вершине барьера) в критическом диапазоне энергий содержится порядка $\ln Z$ квазиуровней, а при $\ell=1$ (излом) - порядка \sqrt{Z} . Соответствующий "квантовой" частоте при критической энергии ω_0 период, например,

для $\ell=2$ равен $\tau_0 = \sqrt{\frac{2m}{3}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \psi\left(\frac{3}{4}\right) + \frac{\pi}{4} \right] + \tau_{\kappa\ell}'$, где $\tau_{\kappa\ell}'$ - классическое время движения вне "шапок" барьеров, а $\psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma}$.

Аналогичные результаты получаются и в случае разных барьеров двусторонней ловушки, где прозрачность в резонансе, однако, не становится полной.

Если же движение происходит в поле, состоящем из $N-1$ одинаковых ямок и двух граничных, разделенных N одинаковыми барьерами, применение оператора перехода через систему барьеров на основе итерирования $\hat{G} = \prod_{\kappa=1}^N \hat{G}_\kappa$ приводит к правилам квантования для зонной части энергетического спектра при $N \rightarrow \infty$ в виде

$$\int \kappa dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22} + (-1)^{s+1} \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{\rho L}{\hbar} \right). \quad (9)$$

где s нумерует зоны, интеграл берется между точками поворота в отдельной ямке при $E < 0$ и точками вершин соседних барьеров, расположенных на расстоянии L , при $E > 0$, а ρ - квазиимпульс (в схеме приведенных зон). Откуда с учетом слабого изменения с энергией ω и T на протяжении зоны следует закон дисперсии

$$E_s(\rho) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{\rho L}{\hbar} \right). \quad (10)$$

Ширина зоны $\Delta E = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \arcsin \sqrt{T}$. Средние энергии зон \bar{E}_s совпадают с квазиуровнями в ловушке из двух барьеров и получаются из уравнения $\int \kappa dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22}$, а "квантовые" частота ω и период τ определяют расстояние между средними энергиями соседних зон и энергетическую плотность зон:

$\bar{E}_{s+1} - \bar{E}_s = \hbar \omega$, $\hbar \frac{ds}{dE} = \tau = \tau_{\kappa\ell} - 2\hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE}$. Плотность состояний в зоне

$$\nu(E) = \frac{N \cos \frac{\pi(E - \bar{E}_s)}{\hbar \omega}}{\hbar \omega \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\pi(E - \bar{E}_s)}{\hbar \omega}}}. \quad (11)$$

В случае экспоненциально малой прозрачности отдельных барьеров ("глубокое туннелирование") результаты для ловушек и зон переходят в известные.

В работе рассматриваются свойства энергетических зон в критическом диапазоне энергий, исследуется тонкая структура зонной части спектра при конечном N и влияние граничных условий $/21/$, а также особенности граничных (таммовских $/22, 23/$) ветвей энергетического спектра. Кроме того, в диссертации решается аналогичная задача о квазистационарных состояниях, возникающих при инфинитном движении в ограниченном периодическом потенциальном поле $/24/$. Оба подхода в пределе неограниченного потенциала дают одинаковые результаты для зонного энергетического спектра и дополняют друг друга, давая картину происхождения зонной структуры с учетом влияния конечности протяженности потенциала и граничных условий. С другой стороны, рассматривается задача резонансного отражения волн периодической средой. Обе задачи решаются вычислением коэффициента прозрачности T_N , полюсы аналитического продолжения которого дают среднюю энергию и ширину энергетического распределения (определяющую время жизни) квазистационарного состояния, совпадающих в первом приближении соответственно с резонансным значением энергии и шириной резонанса. Расчет дает

$$T_N = \left[1 + \frac{R}{T} \left(\frac{\sin N\nu}{\sin \nu} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (12)$$

где $\sqrt{T} \cos \nu = \cos(kax - \varphi_2)$. Резонансная прозрачность $T_N = 1$ наступает при квазиуровнях

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \operatorname{tg} \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{\pi n}{N} \right), \quad n = 1, \dots, N-1, \quad (13)$$

образующих зоны с $N-1$ подуровнем в каждой и вычисляемых из подобного (9) уравнения в форме правила квантования. Ширина квазиуровней при $N \gg 1$ равна

$$\gamma = \frac{\hbar \omega \sqrt{T} \sin \frac{\pi n}{N}}{\pi N \sqrt{1 - T (\cos \frac{\pi n}{N})^2}} A_2 \operatorname{sh} \left(\sqrt{\frac{T}{R}} \sin \frac{\pi n}{N} \right). \quad (14)$$

В диссертационной работе более подробно рассматриваются также параметры квазиуровней в критическом диапазоне энергий для степенных барьеров /24/.

Кратко о структуре работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, приложений и списка литературы.

Во введении рассматриваются: общий круг вопросов, исследуемых в диссертации, методы расчётов, некоторые черты квазиклассического приближения, определение особенностей потенциальных полей, моделирующих физические условия квантовомеханического движения. Дается краткий обзор работ по тематике диссертации, формулируются цели работы, приводится ряд вопросов, не вошедших в рамки диссертации, а также смежных проблем.

В первой главе ("Граничные особенности"), основанной на работе /4/, исследуются свойства граничной фазы, выясняется её физический смысл в стационарных и нестационарных состояниях. Рассматриваются правила квантования для потенциальной ямы с граничными особенностями в критическом диапазоне энергий, приводящие к особым свойствам структуры энергетического спектра. Вычислены значения граничной фазы при степенном ходе потенциальной энергии вблизи границ движения. Рассмотрено влияние размытия границы металла на свойства электронов проводимости в потенциальных моделях строения границы.

Во второй главе ("Внутренние особенности") вводится оператор перехода через внутреннюю особенность потенциала — матричная методика связи линейно независимых решений уравнения Шредингера для стационарных состояний по разные стороны от

особенностей потенциальной энергии /4/. Исследуются общие свойства этого оператора. Приводятся примеры расчёта его матричных элементов. Обсуждается его роль. Рассматривается применение оператора перехода через особенность для исследования структуры энергетического спектра в потенциальной яме с внутренней особенностью. Приводятся конкретные примеры расчёта для степенных вершин потенциала и для некоторых других особенностей.

В третьей главе ("Рассеяние") исследуется вопрос о прохождении частиц через особенности потенциала в инфинитном движении - задача о рассеянии. Выведена общая связь характеристик рассеяния (стационарных и нестационарных) с параметрами оператора перехода через барьер. Детально изучено рассеяние на потенциалах со степенным ходом в критическом диапазоне энергий и при больших энергиях /5/. Развиваются специальный метод теории возмущений в квазиклассическом приближении для критического диапазона энергий и особый метод уточнённого квазиклассического приближения при больших энергиях. Затем исследуется резонансное рассеяние и распад квазистационарных состояний в потенциальных ловушках /19/ и в моделирующей периодические среды цепочке потенциальных барьеров /24/.

Четвёртая глава ("Зоны") посвящена задаче о структуре энергетических зон и граничных (таммовских) уровней энергии в ограниченном периодическом потенциале при различных граничных условиях /21/. Получены как общие уравнения в форме правил квантования, так и закон дисперсии и граничные энергетические ветви. Приведены результаты для конкретных моделей со степенным ходом потенциала вблизи вершин барьеров.

После краткого заключения, где подытожены результаты исследований, идут приложения, содержащие некоторые вычисления

и специальные разделы диссертации математического плана. В конце приложений собраны рисунки и графики, а завершает изложение список литературы.

Основные результаты диссертации докладывались в теоретическом отделе Института физических проблем АН СССР в 1972 году и опубликованы в статьях /4,5,18,19,21,24/.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. И.М.Лифшиц, М.Я.Азбель, М.И.Каганов. Электронная теория металлов, М., "Наука", 1971.
2. М.Я.Азбель. ЖЭТФ, 39, 1276, 1960.
3. Г.Е.Зильберман. ЖЭТФ, 33, 387, 1957; 34, 748, 1958.
4. В.В.Ульянов. УФЖ, 18, 1848, 1973.
5. В.В.Ульянов. УФЖ, 19, 846, 1974.
6. И.М.Лифшиц, А.М.Косевич. ДАН СССР, 91, 795, 1953; Изв.АН СССР, сер.физ., 19, 395, 1955; ЖЭТФ, 29, 742, 1955.
7. R.L.Dewar, N.E.Frankel. Phys. Rev., 165, 283, 1968.
8. С.С.Недорезов. ЖЭТФ, 51, 869, 1966; 56, 299, 1969.
9. R.Stratton. Phys. Lett., 19, 556, 1965.
10. С.С.Недорезов. Изв.вузов СССР, Физика, № 3, II, 1965.
11. А.В.Чалик, М.В.Энтин. ЖЭТФ, 55, 990, 1968.
12. М.И.Каганов, С.С.Недорезов, А.М.Рустамова. ФТТ, 12, 2275, 1970.
13. J.B.Krieger, M.L.Lewis, C.Rosenzweig. J.Chem.Phys., 47, 2942, 1967.
14. Н.Фреман, П.У.Фреман. ВКБ-приближение, М., "Мир", 1967.
15. Н.И.Жирнов. Изв.вузов СССР, Физика, № 9, 58, 1972.
16. В.Л.Покровский, И.М.Халатников. ЖЭТФ, 40, 1713, 1961.
17. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

18. В.В.Ульянов, Нгуен Дык Тьен. Изв. вузов СССР, Физика, № 5, 135, 1974.
19. В.В.Ульянов. УФЖ, 19, 1736, 1974.
20. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., "Наука", 1966.
21. В.В.Ульянов. УФЖ, 19, 867, 1974.
22. И.М.Лифшиц, С.И.Пикар. УФН, 56, 531, 1955.
23. С.Дэвисон, Дж.Лэвин. Поверхностные (таммовские) состояния, М., "Мир", 1973.
24. В.В.Ульянов. УФЖ, 19, 2046, 1974.

Ответственный за выпуск - кандидат физико-математических наук, доцент И.И.Фелько.

БЦ № 50065 Подписано к печати 5.III. 1975 г.

Объем 0,9 п.л. Формат 60x84 1/16 Заказ 109 Тираж 150

Ротапринт ХГУ, г.Харьков, ул.Университетская, 23.

АКАДЕМИЯ НАУК УССР
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

На правах рукописи

УЛБЯНОВ Владимир Владимирович

УДК 530.145:536.7

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ
ЛОКАЛЬНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ И ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Специальность 01.04.02 – теоретическая и математическая
физика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Харьков -- 1986

Работа выполнена в Харьковском ордена Трудового Красного Знамени и ордена Дружбы Народов государственном университете им. А.М.Горького

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор,
член-корреспондент АН УССР ПЕЛЕТМИНСКИЙ С.В.,
доктор физико-математических наук, профессор
ФЕДОРЧЕНКО А.М.,
доктор физико-математических наук, профессор
ПЕРЕСАДА В.И.

Ведущая организация - Институт радиофизики и электроники АН УССР.

Защита состоится " 3 " марта 1987 г.
в _____ часов на заседании специализированного совета
Д 016.27.01 при Физико-техническом институте низких температур АН УССР (310164, Харьков, проспект Ленина, 47).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке
ФТИНТ АН УССР.

Автореферат разослан " _____ " _____ 198 г.

Ученый секретарь
специализированного совета

ХАЩЕКО Е.Н.

Актуальность темы. Квантовая теория является не только фундаментальной общетасетической дисциплиной, но и основой многих прикладных направлений теоретической физики. Продвижение по пути познания квантовых закономерностей представляет собой важную актуальную задачу исследований, требующую разработки адекватных теоретических методов. К их числу относятся интегральные методы, рассмотренные в диссертации. Среди них особое значение имеют методы исследования энергетического спектра. Сама по себе задача разработки, развития новых методов, а также расширения и совершенствования уже существующих подходов всегда злободневна.

Проблема энергетического спектра физических систем является центральной для квантовой теории. В отличие от многих других физических характеристик, энергия требует детального исследования для каждой конкретной системы заново. В связи с этим в работе особая роль отведена методам изучения спектра энергии, среди которых одно из первых мест занимает квазиклассическое приближение. Значение квазиклассики определяется как универсальностью по отношению к квантовым системам, так и близостью к классическому описанию.

Интегральные уравнения и функции Грина служат в диссертации эффективным инструментом исследования квантовых свойств локальных неоднородностей, средством изучения критических параметров и выработки критериев возникновения локальных связанных состояний, существенных для современной теории реальных твердых тел.

Достижения технологии слоистых сред и перспективы их

технического использования в устройствах квантовой микро-электроники требуют пристального внимания к исследованию квантовых свойств движения квазичастиц в таких средах. Это и вопросы резонансных явлений, и тесно связанные с ними вопросы энергетической зонной структуры. Разного рода структурные превращения в зонах, модели со структурными переходами в наши дни вызывают большой интерес исследователей.

По-прежнему актуальной остается проблема повышения точности методов исследования энергетического спектра. Существенный прогресс здесь достигнут благодаря разработке новых численных алгоритмов и внедрению машинных методов. Все более широкое распространение получают теоретические исследования, при которых сочетаются аналитические методы с вычислительным экспериментом. Хорошо известны достижения на этом пути при изучении физических проблем (например, в солитонной физике). Именно таким способом в диссертации обнаружены особые структурные превращения в энергетических зонах эффективного потенциала, описывающего спиновые системы.

Обнаружение новых классов точных решений уравнения Шредингера во все времена является актуальным, поскольку они составляют незыблемую основу квантовой теории, ее золотой фонд. Особое значение точные решения приобретают в настоящее время в связи с бурным развитием вычислительной физики, являясь тестовыми примерами для компьютерных методов исследования квантовых явлений.

Единство рассмотренных в диссертации методов на базе их интегрального характера, а также объединения различных конкретных задач в рамках одного метода исследования (например,

энергетической плотности состояний) позволяют достичь более глубокого понимания природы явлений и их взаимосвязей, что является актуальным всегда.

Таким образом, вышеизложенное позволяет сделать заключение об актуальности темы диссертации.

Цель работы состоит в теоретическом исследовании локальных неоднородностей и периодических структур, квантовых граничных и размерных явлений в твердых телах с помощью специально разработанных интегральных методов. Поставлена задача изучения квантовых закономерностей движения квазичастиц, предсказания новых эффектов, теоретической разработки принципов создания новых устройств и материалов с заданными свойствами. Интегральные методы рассматриваются в диссертации и как объект исследования, и как средство решения практических задач.

Научная новизна результатов диссертации.

1. Впервые поставлена и решена задача об общей формулировке правил квантования энергии для произвольных квантовых систем на основе предложенного и развитого в диссертации подхода, названного "нефункциональным" (НФП). Последовательно развита теория нелокальной квазиклассики, основанная на НФП. Единообразно получены квазиклассические правила квантования для весьма общей зависимости гамильтониана от импульса, для многомерных случаев, для высоких приближений и с учетом особенностей потенциальных полей.

2. Впервые на основе интегральных уравнений установлен общий критерий существования локальных связанных состояний, учитывающий влияние различных факторов (характера закона дисперсии, вида граничных условий, значения размерности

пространства и т. п.) и сформулированный на языке энергетической плотности состояний. Предсказано сохранение связанного состояния в скомпенсированном локализованном слабом одномерном поле и указано критическое условие его вытеснения. Предсказаны новые резонансные эффекты при прохождении квазичастиц сквозь плоскостные среды. Впервые построена общая теория влияния одной среды на связанные состояния в другой.

3. Новым является обобщение квантового соотношения неопределенностей на случай двух физических величин, взятых в разные моменты времени, и с учетом корреляции между ними.

4. Предложен новый принцип получения сред с искусственно созданными периодическими свойствами.

5. Новые классы точных решений уравнения Шредингера обнаружены при исследовании спиновых систем с помощью метода эффективных полей на основе идеи спин-координатного соответствия.

6. Новые необычные превращения энергетических зон, названные в диссертации спиновыми периодическими структурными переходами, предсказаны и обнаружены на основе сочетания аналитических и численных методов.

7. Новыми являются разработанные и отлаженные программы численного счета, написанные на языках высокого уровня и реализованные на больших ЭВМ и персональных компьютерах.

Развитые интегральные методы и проведенные с их помощью теоретические исследования составляют основу перспективного научного направления квантовой теории локальных неоднородностей и периодических структур.

Практическое значение. Развите в работе интегральные методы применимы к различным системам, помимо рассмотренных в диссертации. Результатом развития идей и методов диссертации явилось новое направление теории спиновых систем -- концепция спин-координатного соответствия и описание спиновых систем с помощью потенциальных полей, уже нашедшие практического приложения в теории магнитных явлений. Практического воплощения следует также ожидать от предложенных принципов построения систем с искусственно создаваемыми периодическими регулируемыми свойствами. Главные результаты работы вошли в изданную монографию автора. Материалы диссертации найдут практическое приложения в работах специалистов, поскольку касаются общетеоретических и фундаментальных проблем квантовой теории.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались на XVI Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений (Тула, 1983 г.), на Всесоюзном семинаре по спиновым волнам (Ленинград, 1984 г.), на конференции молодых ученых по теоретической физике (Киев, 1984 г.), на Всесоюзном семинаре по спиновым волнам (Ленинград, 1986 г.), на конференциях молодых ученых ХГУ (1983 г. и 1984 г.), на семинарах в Донецком физико-техническом институте АН УССР (1983 г.), Киевском госуниверситете (1983 г.); Физико-техническом институте низких температур АН УССР (Харьков, 1986 г.). Материалы диссертации неоднократно докладывались в теоретическом отделе ИФП АН СССР у академика И.М.Лифшица.

Публикации. Результаты исследований, составляющие основное содержание диссертации, опубликованы в двадцати работах, включая монографию.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех разделов, заключения, списка литературы и пяти приложений. Она содержит 236 страниц машинописного текста, включая 4 рисунка и библиографию из 158 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении дан общий обзор современного состояния исследуемых вопросов, обоснована актуальность темы диссертации, определена цель работы и указаны основные задачи исследования, кратко изложено содержание разделов диссертации, обсуждаются научная новизна полученных результатов и их основные применения, а также сформулированы выносимые на защиту основные положения.

В первом разделе диссертации исследуются вопросы, связанные главным образом с методом квазиклассического приближения. Изложены основы принципиально нового подхода, условно названного "нефункциональным" (НФП), т. е. не связанным с обычным для ВКБ-метода решением дифференциального уравнения Шредингера для волновых функций стационарных состояний. Аналогом такого подхода является, например, метод Кубо в квантовой теории неравновесных процессов, где также искомые физические величины получают непосредственно, минуя стадию кинетических уравнений.

На этом пути удается простым и кратким способом построить правила квантования энергии в самой общей форме и получить квазиклассические разложения для характеристик движения в любом требуемом приближении и для разного вида гамильтонианов.

Первый параграф "Число и плотность состояний" посвящен двум физическим характеристикам - энергетической плотности состояний $\nu(\epsilon) = \text{Sp} \delta(\epsilon - \hat{H})$ и соответствующей функции числа состояний $\Gamma(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} \nu(\epsilon') d\epsilon' = \text{Sp} \theta(\epsilon - \hat{H})$, где $\delta(x)$ - функция Дирака, а $\theta(x)$ - ступенчатая функция Хевисайда с половинным значением в нуле.

Обсуждаются общие свойства этих интегральных характеристик движения, разделение их на плавную и осциллирующую части.

Далее рассматривается квазиклассическое разложение для таких величин, являющихся частным случаем операторных инвариантов - шпуров вида $\text{Sp} f(\hat{H})$. При этом первое квазиклассическое приближение получается достаточно просто для произвольных гамильтонианов $H(\hat{p}, \hat{r})$ в пренебрежении некоммутативностью операторов координат и импульсов.

Для нахождения поправок второго и более высоких приближений можно воспользоваться связью энергетической плотности состояний с резольвентой гамильтониана $\hat{R}(z) = (\hat{H} - z)^{-1}$:

$$\nu(\epsilon) = (2\pi i)^{-1} \text{Sp} [\hat{R}(\epsilon + i0) - \hat{R}(\epsilon - i0)],$$

а также квазиклассической аппроксимацией для резольвенты, приведенной в приложении 2 к диссертации. В n -мерном случае для гамильтонианов вида $H = T(\hat{p}) + U(\hat{r})$ приходим к выражению

$$\begin{aligned} \text{Sp} f[H(\hat{p}, \hat{r})] &= h^{-n} \iint d\hat{r} d\hat{p} \left(f[H(\hat{p}, \hat{r})] - \right. \\ &\left. - (\hbar^2/24m) \{ 2\Delta U f''[H(\hat{p}, \hat{r})] + (\nabla U)^2 f'''[H(\hat{p}, \hat{r})] \} \right). \end{aligned}$$

Другой путь реализации квазиклассического приближения - использование преобразования Лапласа для сингулярных функций числа и плотности состояний. Показано, что результат второго

приближения весьма просто получается с помощью некоторой симметризации операторной экспоненты $\exp(-\beta \hat{H})$, разобранный в приложении 3 при достаточно общей зависимости кинетической энергии от импульса. Для числа состояний это приводит в одномерном случае к выражению

$$\Gamma(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \left[\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) \right],$$

где интегрирование ведется между точками поворота.

Рассматриваются также другие способы квазиклассического разложения интересующих нас величин и разного рода обобщения.

Во втором параграфе "Квантование энергии в нефункциональном подходе" отмечаются две проблемы квазиклассического приближения - нахождение уровней энергии и получение квазиклассических аппроксимаций для различных физических характеристик движения. Обсуждаются традиционные способы решения этих задач в ВКБ-методе.

Основой НФП при построении правил квантования энергии в отсутствие вырождения, например в одномерном случае, является точное соотношение

$$\Gamma(E_n) = n + 1/2; \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

для реализации которого необходимо каким-то способом вычислить функцию числа состояний в зависимости от энергии $\Gamma(E)$. Например, найденное в первом параграфе квазиклассическое разложение этой функции сразу же приводит в одномерном случае к правилам квантования второго приближения

$$\int p dx - \frac{\hbar^2}{24} \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \frac{\partial T}{\partial p} dx + O(\hbar^4) = \pi \hbar (n + 1/2),$$

которое для квадратичного закона дисперсии $T(p) = p^2/2m$ переходит в известный результат.

Далее обсуждаются различные аспекты преимуществ НФП-квазиклассики в сопоставлении с обычными ВКБ-способами, вопросы точности квазиклассического приближения, особенно в области малых значений энергии, влияние сингулярностей потенциальных полей, обобщения на многомерные случаи, возможности иных аналогичных построений правил квантования в рамках НФП, основанных не на функции числа состояний $\Gamma(E)$, а на некоторых рекуррентных соотношениях, в которые входят подобные этой функции операторные инварианты.

В третьем параграфе "Нефункциональный подход для характеристик движения" рассмотрено приложение НФП к нахождению различных физических величин в квазиклассическом приближении. В частности, показано, каким образом можно получить средние значения в стационарных состояниях для произвольной функции от координат. Рассмотрены также другие примеры характеристик движения — квантовые периоды и частоты, распределения вероятностей координат и импульсов.

Обсуждаются влияние особенностей потенциала и роль зависимости от энергии фазовой добавки в правилах квантования, а также появление критических диапазонов энергии, где расстояние между уровнями существенно отличается от обычного для квазиклассики соотношения $\Delta E = \hbar \omega_{\kappa\lambda}$, поскольку классические частоты $\omega_{\kappa\lambda}$ переходят в соответствующие квантовые величины $\omega_{\kappa\lambda}$, названные квантовыми частотами.

В четвертом параграфе "Некоторые вопросы квазиклассического приближения" дан обзор развития квазиклассики, обсуждаются ее проблемы и перспективы.

Описаны зарождение, первые шаги и общая роль квазиклассики, ее достоинства, обеспечиваемая точность и универсаль-

ный характер как переходной области, когда сохраняются многие классические черты движения и одновременно охватываются основные квантовые эффекты.

Прослежены главные этапы развития метода квазиклассического приближения (по десятилетиям). Отмечаются нерешенные вопросы, требующие дальнейшей разработки этого метода. Высказаны соображения о путях их решения.

В НФП удачно проявляется интегральный, сглаживающий характер квазиклассики, чем достигается охват движения в целом, в усредненном виде и обеспечение хорошей точности даже для слабозвозбужденных состояний.

Пятый параграф "Нефункциональный подход вне квазиклассики" иллюстрирует применения правил квантования энергии НФП, не связанные с квазиклассическим приближением. В качестве примера, демонстрирующего возможности достаточно простого точного решения, рассмотрено, как НФП дает уровни энергии гармонического осциллятора с помощью преобразования Лапласа и специальной формы симметризации операторной экспоненты.

Затем развивается теория возмущений и выведены формулы для сдвига уровней энергии и квантового периода колебаний, а также получены выражения для расстояния между соседними уровнями энергии, определяемые таким квантовым периодом. Обсуждаются и другие результаты.

Отмечаются те места диссертации, где также используются приемы и методы в духе НФП (например, определитель Фредгольма во втором разделе работы при изучении локальных связанных состояний и операторные инварианты при обобщении соотношения неопределенностей из третьего раздела диссертации).

Первый раздел диссертации завершается параграфом "Итоги и перспективы нелокальной квазиклассики", в котором, в частности, отмечается следующее.

В методе квазиклассического приближения можно выделить две основные проблемы: квантование энергии и описание различных характеристик движения. Показано, что нелокальный подход, развитый в первом разделе работы, позволяет решать задачи обоих типов.

Для подтверждения основных теоретических положений приведены образцы расчетов для типичных случаев (произвольная зависимость кинетической энергии от импульса, учет особенностей потенциального поля, многомерные системы, получение более высоких квазиклассических приближений), отдельных конкретных характеристик (число и плотность состояний, уровни энергии, средние значения, квантовые периоды и частоты) и вариантов реализации правила квантования РФП (связь с резольвентой гамильтониана, преобразование Лапласа, операторная симметризация экспонент). Отобраны достаточно простые примеры, наглядно иллюстрирующие основные идеи РФП и не требующие громоздких расчетов.

Оценка эффективности РФП произведена на основе точно решаемых моделей и с помощью численных методов, реализованных на современных ЭВМ.

В основу уравнения квантования РФП кладется связь числа состояний как функции энергии с квантовым числом, нумерующим уровни энергии. Продемонстрирована простота получения квазиклассических правил квантования энергии с помощью РФП, особенно в первом и втором приближениях.

В отличие от обычного "функционального" подхода ВКБ-мето-

да, опирающегося на теорию дифференциальных уравнений и аналитические свойства входящих в эти уравнения величин, правила квантования ИФП не ограничиваются ни квадратичным законом дисперсии, ни плавным поведением потенциала. При этом не нужно остерегаться точек поворота, учитывать только состояния высокого возбуждения и т. п.

Чрезвычайно важно, что правила квантования ИФП пригодны для систем различной природы, например для спиновых.

Формально уравнение квантования ИФП можно применить и для большого числа измерений, хотя возникают трудности в связи с классификацией стационарных состояний. Правда, для основного уровня энергии правила квантования ИФП сохраняют силу, но здесь нельзя надеяться на большую точность при квазиклассическом разложении.

ИФП оказывается адекватным квазиклассическому приближению (он хорошо приспособлен для реализации процедуры разложения по степеням постоянной Планка), хотя его удобно применять и вне рамок квазиклассики.

Поправки к обычным правилам квантования Бора-Зоммерфельда бывают двух типов: квазиклассическое разложение по степеням \hbar^2 и фазовая добавка γ . Исследование квазиклассического движения в потенциальных полях с особенностями типа максимумов, изломов и т. п. показало, что в некотором критическом диапазоне энергий структура энергетического спектра может существенно отличаться от обычной для квазиклассического приближения. Это связано с тем, что зависимость фазовой добавки от энергии $\gamma(E)$ компенсирует особенности соответствующих классических величин (периодов и частот), которые заменяются аналогичными квантовыми характеристиками.

Второй раздел диссертации посвящен исследованию критических и резонансных свойств локальных связанных состояний квазичастиц (главным образом при их движении в плоскостных средах).

На основе интегральной формы стационарного уравнения Шредингера проанализирована роль различных факторов в квантовой проблеме существования связанных состояний в потенциальных полях, а также в задаче резонансного прохождения квазичастиц сквозь слоистые среды. Построена теория влияния одной среды на формирование связанных состояний в другой.

В первом параграфе этого раздела "Функции Грина и интегральные уравнения для стационарных состояний" рассматривается переход к интегральной форме записи стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении:

$$\psi(\vec{r}) = - \int d\vec{r}' R_0(\vec{r}, \vec{r}'; E) U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'),$$

где $R_0(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ - функция Грина невозмущенного движения, т. е. координатные матричные элементы резольвенты невозмущенного гамильтониана $\hat{R}_0(E) = (\hat{H}_0 - E)^{-1}$, а роль возмущения играет потенциал $U(\vec{r})$. Отмечаются различные способы вычисления функций Грина для конкретных систем, в частности для плоскостных и полуограниченных сред. Обсуждается общий ход решения задачи о собственных значениях на основе теории интегральных уравнений. Приведены расчеты некоторых функций Грина и иллюстрации их применения.

Во втором параграфе "Проблема существования локальных связанных состояний" дан общий обзор состояния теории и физической роли изучаемой проблемы, обрисованы квантовые особенности рассматриваемых явлений.

На основе интегрального уравнения строится теория локальных

связанных состояний в плоскостных средах в случае слабого поля с помощью определителя Фредгольма и рядов Фредгольма. В частности, для величины \mathcal{E} , определяющей энергию связи $|E| = \hbar^2 \mathcal{E}^2 / 2m$, выведена формула $\mathcal{E} = - (m/\hbar^2) \int dx U(x) - (m/\hbar^2)^2 \iint dx_1 dx_2 U(x_1) U(x_2) |x_1 - x_2| + O(U_0^3 a^5)$, где a характеризует размеры области действия поля, а U_0 его величину. Показано, что для полей притяжения при наличии отталкивания в случае равного нулю потенциала в среднем $(\int dx U(x) = 0)$ связанное состояние все еще сохраняется, хотя энергия связи оказывается весьма малой (порядка U_0^4). Найдено критическое условие вытеснения связанного состояния при усилении отталкивания. Получены выражения для волновых функций соответствующих стационарных состояний, а также некоторых средних величин.

Далее обсуждается применение различных вариационных методов для расчета собственных значений энергии, включая методы теории Гильберта-Шмидта.

Затем на основе общих свойств функций Грина устанавливается критерий существования локальных связанных состояний для различных размерностей пространства и законов дисперсии, выраженный на языке энергетической плотности состояний. Если при малых энергиях плотность состояний имеет степенную зависимость $\nu(E) \sim E^{\alpha-1}$, то критерием существования связанных состояний служит соотношение $\alpha \leq 1$. Например, для ℓ -степенного закона дисперсии $T(\vec{p}) \sim |\vec{p}|^\ell$ в n -мерном пространстве имеем $\alpha = n/\ell$, так что связанные состояния в слабом поле притяжения существуют при $n \leq \ell$. В частности, для квадратичного закона дисперсии отсюда вытекает известное условие $n \leq 2$: как угодно слабые одно- и двумер-

ные поля притяжения способны удерживать частицу в связанном состоянии.

В случае $\alpha > 1$ связанное состояние появляется только при достаточно большой величине поля (критической). В заключение этого параграфа рассмотрен вопрос о нахождении критических значений полей с трехмерной локализацией на основе различных аппроксимаций, эффективность которых оценивается сопоставлением с результатами для точно решаемых моделей.

В третьем параграфе "Влияние одной среды на связанные состояния в другой" основная группа рассматриваемых вопросов относится к плоскостойким структурам и решается на основе одномерных моделей поля. Особый интерес вызывает случай двух сред, разделенных плоской границей, когда в одной из сред имеется локализованная область эффективного притяжения.

Рассматриваются общие аспекты влияния областей отталкивания на формирование связанных состояний, а также конкретные случаи различной интенсивности и расположения локализованных полей притяжения и отталкивания.

Отдельно изучена задача о влиянии граничного условия непроницаемости на локальное связанное состояние (движение в полуграниченной среде). Выведено общее дисперсионное уравнение и рассмотрены различные вытекающие из него следствия: критическое расстояние до границы движения, при котором связанное состояние вытесняется, зависимость энергии связи от расположения области притяжения по отношению к границе и т. п. Развивается метод аппроксимации локализованных полей на основе дельта-моделей потенциала. Вычислены различные средние значения физических величин. Установлен соответствующий критерий существования связанных состояний в слабых полях для полуграничен-

ного движения, который для ℓ -степенного закона дисперсии в n -мерном случае сводится к условию $n \leq \ell - 2$. Вытекающее отсюда для квадратичного закона дисперсии неравенство $n \leq 0$ означает, что уже в одномерном слабом поле связанное состояние может отсутствовать. Напротив, четверной закон дисперсии приводит к условию $n \leq 2$, другими словами, позволяет сохранить связанное состояние и в одномерном, и в двумерном полях, несмотря на вытесняющее влияние границы движения.

Другой рассмотренный случай отвечает ситуации, когда область притяжения расположена как раз на границе двух однородных сред. С помощью метода интегральных уравнений удается найти критическое условие вытеснения связанных состояний в области притяжения за счет перепада предельных значений потенциала на бесконечности $\Delta U = U(-\infty) - U(\infty)$. Оказывается, что $\Delta U_{кр} = 4|E_0|$, где $|E_0|$ — энергия связи в отсутствие скачка потенциальной энергии.

Параграф завершается рассмотрением общего случая двух однородных сред с плоской границей раздела, т. е. задачей о влиянии ступенчатого потенциала на связанное состояние в локальной потенциальной яме. Получено дисперсионное уравнение и вытекающие из него физические выводы о критических параметрах связанных состояний. Дан краткий обзор работ по теории локализованных связанных состояний и методу интегральных уравнений.

В четвертом параграфе "Резонансные явления в плоскостойких структурах" обсуждаются интересные резонансные квантовые эффекты, возникающие при прохождении частиц сквозь среды с плоскостойким строением.

К их числу относятся: резкое увеличение прозрачности среды для медленных частиц в критической ситуации появления связанных состояний, возникновение квазиуровней при прохождении частиц сквозь слои с несколькими областями эффективного отталкивания (ловушки двустороннего типа) и при отражении частиц на границе двух сред (односторонние ловушки), особые резонансные состояния в средах с локализованными областями поглощения и испускания частиц, включая рассеяние в условиях встречных потоков.

При решении всех отмеченных задач применяется метод интегральных уравнений, которые в задачах рассеяния, в отличие от проблемы связанных состояний, являются неоднородными. Развита приема решения на основе резольвенты, миноров и определителей Фредгольма. Введены новые обобщенные характеристики рассеяния. Используются аппроксимация локализованных полей дельта-потенциалами, а также комплексные потенциальные поля.

В пятом параграфе "Что могут функции Грина?" сделана попытка суммировать различные приложения функций Грина в методе интегральных уравнений для описания физических явлений в различных условиях. Уделено особое внимание выявлению непосредственного физического смысла этих функций.

В шестом параграфе "Заключительные замечания о критических и резонансных явлениях" отмечается, что во втором разделе диссертации большое внимание уделено физическому смыслу рассматриваемых вопросов и приложениям обсуждаемых интегральных методов (резольвента, функции Грина, интегральные уравнения, интегральные преобразования). Даны конкретные примеры функций Грина для частиц с различными законами дисперсии в случае разных граничных условий, для некоторых локальных и нелокаль-

ных полей, в пространствах с разным числом измерений (результаты собраны в приложении I к диссертации).

Изучена проблема существования локализованных связанных состояний в самой общей постановке и предложены эффективные способы ее решения, а также даны конкретные приложения получаемых результатов.

Особое внимание уделено слабо связанным состояниям и зависимости энергии связи от параметров поля и внешних условий.

Метод изучения локальных связанных состояний на основе интегрального уравнения оказался удобным для численной реализации и машинного счета (тестовыми примерами служили точно решаемые модели типа конечной прямоугольной ямы и потенциала Эккарта).

Проанализирована взаимозависимость явлений формирования локальных состояний с малой энергией связи и прохождения частиц сквозь плоскостные среды (реальные и виртуальные резонансы, квазиуровни и т. п.), для чего также использована интегральная форма уравнений движения в стационарных состояниях для непрерывного спектра энергии.

Развиваемые интегральные методы относятся как к формулировке интегрального уравнения для волновых функций связанных стационарных состояний, так и к построению аналогичных уравнений для полных функций Грина рассматриваемых систем. С помощью последних затем можно получать и детальные сведения о состоянии квантовой системы (волновые функции и уровни энергии), и интегральные характеристики типа энергетической плотности состояний.

Этот второй подход подобен нефункциональным методам квазиклассики из первого раздела диссертации.

В третьем разделе диссертации рассмотрены вопросы, связанные с некоторыми специальными нелокальными методами (обобщенное соотношение неопределенностей, метод энергетической плотности состояний, метод эффективных полей).

В качестве приложения обсуждаемых методов исследованы: особые свойства квантовых газов (фазовые переходы в бозе-газах со степенной зависимостью плотности состояний от энергии и аномалии некоторых ферми-газов в области промежуточных температур), зоны энергии в эффективно одномерных периодических системах (структура энергетического спектра в случае слабых полей, среды с искусственно создаваемыми регулирующими периодическими свойствами), структурные переходы в моделях эффективного потенциала для спиновых систем.

В первом параграфе этого раздела "Соотношение неопределенностей и его обобщения" проведено обобщение квантового соотношения неопределенностей на случай величин, относящихся к различным моментам времени, а также с более полным использованием неравенства Шварца, дающим возможность учесть вклад от корреляции между исследуемыми физическими характеристиками. Рассмотрены конкретные применения полученных соотношений и обсуждается физический смысл входящих в них величин, играющих важную роль в квантовой кинетике.

Исследованы особенности координатно-импульсных неопределенностей квантовой частицы. Выявлены состояния, в которых обычная оценка (произведение неопределенностей порядка постоянной Планка) оказывается существенно заниженной. Аномально большие значения произведения неопределенностей могут возникать, например, при появлении связанных состояний. Изучение координатно-импульсных аномалий для слабосвязанных состояний продол-

жает тему критических свойств квантового движения квазичастиц из второго раздела диссертации.

Второй параграф "Метод энергетической плотности состояний" начинается с замечаний относительно микроскопического подхода к изучению таких характеристик структуры энергетического спектра, как число и плотность состояний. Исследованы особенности энергетической плотности состояний в конкретных плоскостных средах с учетом граничных эффектов и влияния локализованных связанных состояний.

Далее развивается полуфеноменологический подход, когда рассматриваются свойства систем, зависящие от плотности состояний, которая используется уже в качестве входной величины. Рассмотрены особенности фазовых переходов в бозе-газе с плотностью состояний, имеющей степенной ход при малых энергиях. На примере температурной зависимости химического потенциала и теплоемкости проиллюстрированы особые термодинамические свойства некоторых ферми-газов со степенной энергетической плотностью состояний (в частности, одномерных). Одно из них заключается в необычном поведении теплоемкости в области промежуточных и высоких температур — наличие максимума и превышение классического значения. Проведено сопоставление свойств ферми- и бозе-газов, имеющих степенную плотность состояний.

В третьем параграфе "Метод эффективных полей" дается общий обзор различных подходов в рамках этого метода, отмечается роль дельта-модели потенциальных полей. Установлен критерий применимости таких моделей в случае различных законов дисперсии и размерностей пространства. Обсуждается так называемая сепарабельная аппроксимация в методе интегральных уравнений, также применяемая для приближенного описания локализованных полей.

В четвертом параграфе "Зоны энергии в одномерных периодических системах" построена теория зонного спектра в случае слабых потенциальных полей при низких энергиях. Рассмотрены специфические особенности параметров зон в приближении слабой связи и закон дисперсии в поле, обрезанном локализованными областями притяжения (случай сильной связи). Эффективность аппроксимаций оценивается сравнением с точно решаемыми моделями периодических потенциальных полей.

Предложен новый принцип создания систем с периодическими свойствами. В них движение заряженных частиц происходит вдоль пространственных или плоских линий (винтовая линия и т. п.) в определенном образом ориентированном постоянном электрическом поле. Соответствующие модели, описываемые синусоидальным эффективным потенциалом, допускают квантовомеханический расчет с помощью функций Матве. Энергетический спектр частиц имеет зонную структуру, регулируемую путем изменения электрического поля.

На основе теоретического исследования уровней энергии периодического эффективного потенциала некоторых спиновых систем предсказаны особенности превращений зонной структуры. Установлено, что при каждом целом или полуполом значении спинового параметра потенциала все высокоэнергетические зоны попарно стыкуются (спариваются). При этом происходит обмен четностью между уровнями энергии, обрамляющими закрывающуюся щель, а также появляются точные решения в области низкоэнергетических зон. Этот бифуркационный эффект назван спиновым периодическим структурным переходом.

Третий раздел диссертации завершается параграфом "Резюме по нелокальным методам".

В заключении кратко подытожены основные выводы и результаты диссертации.

Завершают изложение пять приложений, содержащих некоторые вычисления и специальные вопросы математического плана, а также справочные материалы.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

1. В диссертации разработан способ получения правил квантования энергии, не связанный с решением дифференциальных уравнений и названный нефункциональным подходом (НФП). Показана эффективность такого подхода для различных конкретных физических систем. Найдены адекватные НФП приемы построения квазиклассических разложений в случае сложной зависимости гамильтониана от импульса, многомерного движения, для приближений высокого порядка и с учетом особенностей потенциального поля.

2. Нефункциональный подход позволяет получать различные характеристики движения в квантовых системах разной природы, включая спиновые.

3. С помощью метода интегральных уравнений обстоятельно изучена проблема существования локальных связанных состояний. Найдены критические параметры, энергия связи и условия появления локальных связанных состояний в плоскостойких средах. Установленный критерий существования таких состояний учитывает влияние вида закона дисперсии, характера граничных условий, размерности пространства и т. п.

4. Построена теория влияния одной среды на связанные состояния в другой. Получены соответствующие критические условия

в зависимости от перепада потенциала и расположения локальной неоднородности.

5. Теоретически исследованы особенности резонансных явлений при движении квазичастиц в слоистых средах, когда происходит резкое возрастание прозрачности при возникновении связанных состояний (реальный и виртуальный уровни) и в плоскостойких ловушках (квазиуровни).

6. Принципиальное значение имеет полученное в диссертации обобщение соотношения неопределенностей на случай разновременных величин и с учетом корреляции между ними. Это обобщение значительно расширяет область приложений соотношения неопределенностей и углубляет наши представления о причинах взаимосвязи неопределенностей: наряду с квантовой несовместимостью существенна корреляция. Так, в случае коммутирующих величин соотношение неопределенностей целиком определяется корреляцией. На конкретных примерах проиллюстрированы результаты такого обобщения.

7. Полученные в работе результаты для плоскостойких сред (формирование локальных связанных состояний и резонансные явления) могут иметь особую практическую ценность, поскольку современные тонкопленочные технологии позволяют создавать подобные среды, еще недавно представлявшиеся в виде идеализированных моделей. Эти вопросы важны для разработки принципов создания новых материалов с заданными и перестраиваемыми свойствами, что существенно для современной микроэлектроники.

8. Предложенный в работе принцип получения сред с искусственно создаваемыми периодическими свойствами обеспечивает регулируемые фильтрующие свойства основанных на нем устройств. Его можно рекомендовать для практической реализации в будущей

квантовой микроэлектронике.

9. Развитием метода эффективных полей служит новый подход в теории спиновых систем — спин-координатное соответствие и описание спиновых систем с помощью эффективных потенциалов. С одной стороны, этот метод позволил изучить свойства спиновых систем (например, магнитные) с помощью приемов, разработанных для уравнения Шредингера. С другой стороны, он приводит к обнаружению новых классов точных решений уравнения Шредингера.

10. В результате построения эффективного периодического потенциала для квадратичных спиновых систем получена зонная модель с точными решениями и предсказанными в работе необычными свойствами зонного спектра — спиновыми периодическими структурными переходами.

11. Рассмотренные теоретические вопросы дают широкий простор применению численных методов с помощью современных вычислительных машин. Разработанные и отлаженные программы для ЭВМ, с помощью которых дана численная оценка точности использованных приближенных методов, годятся и для других исследований (других конкретных потенциальных полей, других спиновых систем).

12. Выводы диссертации будут способствовать более глубокому пониманию физических процессов в средах с локальными неоднородностями, в слоистых и нитевидных структурах.

Единство различных вопросов достигнуто на основе общности средств решения рассматриваемых в диссертации задач, что позволяет отметить их интегральный характер. Интегральные методы открывают новые пути в теоретическом исследовании квантовых систем.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах.

1. Паргаманик Л.Э., Ульянов В.В. К теории взаимодействия быстрых нейтронов с различными моментами с полупрозрачными ядрами. - ЖЭТФ, 1968, 35, № 1, с. 258-264.

2. Ульянов В.В., Соколов С.С. О теплоемкости двумерных квантовых идеальных газов. - Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 1, с. 153-154.

3. Ульянов В.В. О соотношении неопределенностей. - Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 2, с. 146-148.

4. Ульянов В.В. О квазиклассическом разложении решений уравнения Шредингера для степенного потенциала. - Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 3, с. 126-127.

5. Ульянов В.В., Кальной С.Е. К учету влияния размытия границ на электронные свойства металлов. - Изв. вузов СССР, Физика, 1975, № 3, с. 147-149.

6. Кальной С.Е., Ульянов В.В. О влиянии размытия границ металла на магнитоуплотненные осцилляции магнитной восприимчивости. - Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 7, с. 126-127.

7. Ульянов В.В., Василева М.И. О фазовых переходах в бозе-газе при анизотропных законах дисперсии. - Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 9, с. 120-122.

8. Ульянов В.В., Халаявин А.И. О нефункциональном подходе в ВКБ-методе. - Изв. вузов СССР, Физика, 1976, № 11, с. 148-150.

9. Ульянов В.В., Педан А.Г., Довман К.С. О локальных связанных состояниях. - Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 6, с. 148-150.

10. Ульянов В.В., Кичигина Е.В., Перельмутер М.С. О нелинейных нулевых колебаниях. - Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 9,

с. 135-137.

11. Ульянов В.В., Бабенко В.Д. О квантовых частотах. - Изв. вузов СССР, Физика, 1977, № 9, с. 152-154.

12. Ульянов В.В., Улявин А.И. О нефункциональном подходе в ВКБ-методе. II. - Изв. вузов СССР, Физика, 1978, № 1, с. 143-145.

13. Ульянов В.В., Брук В.В. О локальных связанных состояниях. II. - Изв. вузов СССР, Физика, 1979, № 3, с. 123-125.

14. Ульянов В.В., Евзерская Е.В. О соотношении неопределенностей. II. - Изв. вузов СССР, Физика, 1979, № 8, с. 99-100.

15. Ульянов В.В., Брук В.В. О локальных связанных состояниях. III. - Изв. вузов СССР, Физика, 1980, № 10, с. 97-99.

16. Ульянов В.В., Косевич К.А. О структуре энергетических зон в одномерном случае. - УФМ, 1980, 25, № 3, с. 468-475.

17. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Харьков: Вища школа, 1980. - 216 с.

18. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Харьков: Вища школа, 1982. - 160 с.

19. Заславский О.Б., Ульянов В.В., Цукерник В.М. К теории низкотемпературной восприимчивости спиновых систем с магнитной анизотропией. - ФИТ, 1983, 9, № 5, с. 511-519.

20. Заславский О.Б., Ульянов В.В. Новые классы точных решений уравнения Шредингера и описание спиновых систем с помощью потенциальных полей. - ЖЭТФ, 1984, 87, № 5, с. 1724-1733.

Уи

Ответственный за выпуск — доктор физ.-мат. наук,
профессор А.М. Косевич.

Подписано к печати 14.10.86г. ЕЦ № 08772.

Формат бумаги 60x84 1/16. Объем 1,5 п. л.

Заказ № 5058. Тираж 100 экз.

Харьковский филиал Межвузовского полиграфического
предприятия, 310093, Харьков, ул. Свердлова, 115.

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ В ОСОБЫХ СЛУЧАЯХ

В. В. Ульянов

Квазиклассическое движение частицы с энергией, близкой к значениям потенциала в сингулярных точках типа максимумов, изломов, характеризуется рядом особых свойств. Например, время движения волновых пакетов может существенно отличаться от времени классического движения около классически недостижимых точек поворота, а правила квантования для потенциальной ямы с граничными или внутренними особенностями приводят к энергетическому спектру, в котором не выполняется обычное соотношение $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}$.

В работах [1, 2] исследовался энергетический спектр в случае особенностей потенциальной энергии типа простого максимума внутри потенциальной ямы (или эквивалентная задача в пространстве импульсов при движении частицы с произвольным законом дисперсии в магнитном поле вблизи траекторий с самопересечением).

Представляет интерес рассмотреть влияние различных особенностей потенциала (прежде всего, степенных) на отражение от границ движения, структуру энергетического спектра в потенциальных ямах с граничными и внутренними особенностями, а также рассеяние частиц на особенностях потенциальной энергии.

1. Граничная фаза

Вдали от классической точки поворота волновая функция стационарного состояния финитного или инфинитного в одном направлении движения частицы в обычном квазиклассическом приближении может быть записана [3] в виде

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_b^x k dx - \alpha\right), \quad (1)$$

где $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$, E — энергия частицы, U — потенциальная энергия, b — левая точка поворота, α — левая граничная фаза (аналогична волновая функция и для правой границы). Когда точка поворота удалена от особой точки потенциала, граничная фаза, как известно, равна $\frac{\pi}{4}$, а для непроницаемой стенки $\frac{\pi}{2}$. Вблизи же критической энергии, соответствующей особенности потенциала (максимум, излом, заострение и т. п.), α принимает различные значения в зависимости от энергии и вида особенности и определяет «квантовое» время отражения пакета стационарных состояний

$$t_{\text{кв}} = t_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\alpha}{dE}, \quad (2)$$

$t_{\text{кл}}$ — классическое время движения до точки поворота и назад.

Когда степенная особенность находится у непроницаемой стенки (рис. 1, а), т. е. $U = -\beta x^l$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$, граничная фаза в критическом диапазоне энергий $|E| \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}}$ (энергия отсчитывается от критического значения) имеет вид для $l > 2$

$$\alpha = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2(l+2)} + \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \left(\sin \frac{\pi}{l}\right)^{\Theta(-\lambda)} \operatorname{B}\left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l}\right) -$$

$$- \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{2\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \cdot \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2), \quad (3)$$



Рис. 1.

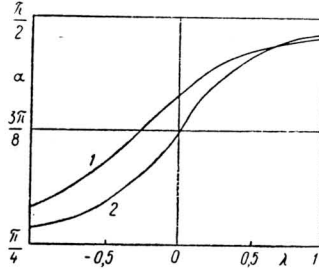


Рис. 2.

для $l = 2$ (квадратичная особенность)

$$\alpha = \frac{3\pi}{8} - \frac{\lambda}{4} \ln |\lambda| + \frac{\lambda}{4} \left(1 + \frac{\pi}{2} - C - \ln 2\right) + O(\lambda^3), \quad (4)$$

для $l = 1$ (линейная особенность)

$$\alpha = \frac{5\pi}{12} + \lambda \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} - \frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda) + O(\lambda^2). \quad (5)$$

Здесь $\lambda = E \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}$, C — постоянная Эйлера, Γ — гамма-функция,

$\Gamma_n = \Gamma\left(\frac{n}{l+2}\right)$, B — бэта-функция, а $\Theta(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0 \end{cases}$. Формулы (3) —

(5) дают хорошую точность не только при $|\lambda| \ll 1$, но и во всем критическом диапазоне $\Delta\lambda \sim 1$, где граничная фаза изменяется от $\frac{\pi}{4}$ до $\frac{\pi}{2}$

(рис. 2, 1 — линейная особенность и 2 — квадратичная, рассчитаны по точным формулам). Для $l > 2$ при критической энергии точка поворота классически недостижима, так что классическое время отражения $t_{\text{кл}} \sim$

$\sim \frac{1}{|\lambda|^{\frac{l-2}{2l}}}$ при всех $|\lambda| \ll Z^l$, т. е. в критическом диапазоне оно велико и расходится при критической энергии, а квантовое время отражения (2) конечно и слабо изменяется с энергией:

$$t_{\text{кв}} = \hbar \frac{d\lambda}{dE} \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + t'_{\text{кл}} + O(\lambda). \quad (6)$$

Для $l=2$ $t_{\text{кл}} \sim \ln \frac{1}{|\lambda|}$ переходит в критическом диапазоне энергий в

$$t_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) \right] + t'_{\text{кл}} + O(\lambda^2) \quad (7)$$

с компенсацией логарифмической расходимости, а для $l=1$

$$t_{\text{кл}} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} [V\bar{Z} - V\bar{\lambda}\Theta(\lambda)] + t'_{\text{кл}} + O\left(\frac{\lambda}{V\bar{Z}}\right) \quad (8)$$

в критическом диапазоне переходит в

$$t_{\text{кв}} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[V\bar{Z} - \frac{3^{4/3}\Gamma^2(2/3)}{4\pi} \right] + t'_{\text{кл}} + O(\lambda), \quad (9)$$

где квантовая поправка лишь сглаживает изломную энергетическую зависимость $t_{\text{кл}}$. Аналогично для всех $l < 2$. Обозначения: $Z =$

$= X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}}$, X — интервал степенного хода потенциала, который предполагается достаточно большим, чтобы уже в нем движение перешло в квазиклассическое, т. е. $Z \gg 1$, $t'_{\text{кл}}$ — классическое время движения вне этого интервала, $\Psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma}$, $\Psi(3/4) = \frac{\pi}{2} - C - 3 \ln 2$.

Когда степенная особенность $U = -\beta x^l$ при $x > 0$ расположена у границы движения, на которой выполняется условие $\Psi'(0) = 0$ (рис. 1, б), граничная фаза в критическом диапазоне энергий имеет вид для $l > 2$

$$\alpha = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2(l+2)} + \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \left(\sin \frac{\pi}{l} \right)^{\Theta(-\lambda)} B \left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l} \right) - \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{2\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi}{l+2} \right) \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2), \quad (10)$$

для квадратичной особенности

$$\alpha = \frac{\pi}{8} - \frac{\lambda}{4} \ln |\lambda| + \frac{\lambda}{4} \left(1 - \frac{\pi}{2} - C - \ln 2 \right) + O(\lambda^3), \quad (11)$$

для линейной особенности

$$\alpha = \frac{\pi}{12} - \frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda) + \lambda^2 \frac{3^{2/3} \Gamma^2(1/3)}{8\pi} + O(\lambda^4). \quad (12)$$

Формулы для времен отражения подобны (6), (7) и (9). Аналогичные результаты получены при другом расположении особенностей (рис. 1, а — у границы свободного движения, з — на плавном фоне, д — при двойной особенности).

2. Структура спектра в потенциальной яме с граничными особенностями

Правила квантования в обычном квазиклассическом приближении для одномерной потенциальной ямы [3]

$$\oint k dx = 2\pi(n + \gamma), \quad (13)$$

где n — целое число, $0 < \gamma < 1$, а величины, пропорциональные постоянной Планка, не учитываются. Обычно γ очень слабо зависит от энергии и не оказывает влияния на структуру энергетического спектра, но в критическом диапазоне вследствие сильной зависимости γ от энергии спектр перестраивается по сравнению с правилом

$$\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}, \quad \text{или} \quad \hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кл}}, \quad (14)$$

$\tau_{\text{кл}}$ и $\omega_{\text{кл}}$ — период и частота классического колебания, $\hbar = 2\pi\hbar$. Для ямы с граничными особенностями $\gamma = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\pi}$, $\alpha_{1,2}$ — левая и правая граничные фазы, и из (13) для энергетической плотности спектра получаем

$$\hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d}{dE}(\alpha_1 + \alpha_2). \quad (15)$$

Правая часть этого равенства, как видно из (2), соответствует пакетному периоду колебаний, т. е. $\hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кв}}$, а расстояние между уровнями

$$\text{энергии } \Delta E = \hbar \omega_{\text{кв}}, \quad \omega_{\text{кв}} = \frac{2\pi}{\tau_{\text{кв}}}.$$

В случае особенности у непроницаемой стенки для $l > 2$ классический период колебаний при критической энергии расходится, т. е. обычное правило (14) давало бы большую плотность спектра в критической области энергий $\frac{dn}{d\lambda} \sim \frac{1}{l-2}$. Если (6) подставить в (15), то полу-

чим, что плотность спектра конечная, плавно изменяющаяся, но в критическом диапазоне содержится лишь несколько уровней. Для квадратичной особенности классический период при критической энергии расходится логарифмически, что по правилу (14) привело бы и к расходимости плотности спектра $\frac{dn}{d\lambda} \sim \ln \frac{1}{|\lambda|}$, а квантовый период (7) конечен

и очень мало изменяется в критическом диапазоне, так что предсказываемое обычными правилами (14) логарифмическое уплотнение спектра в

критической области компенсируется квантовой добавкой за счет изменения γ и приводит к эквидистантности спектра практически во всем критическом диапазоне, где $E_n = \hbar \omega_{\text{кр}}(n - n_0)$ для $|n - n_0| \lesssim \ln Z$, $\omega_{\text{кр}}$ определяется (7), т. е. в критическом диапазоне содержится достаточно много уровней ($\sim \ln Z \sim \ln n_0$). Величина n_0 определяется из уравнения

$\oint k dx|_{E=0} = 2\pi [n_0 + \gamma(0)]$. Для линейной особенности классический период колебаний (8) конечен при всех энергиях, а квантовая поправка мала, но она сглаживает (см. (9)) излом плотности спектра при критической энергии ((8) и (14)), и в критической области содержится много

уровней ($\sim \sqrt{Z}$), так что спектр сохраняет приближенную эквидистантность (аналогично для всех $l < 2$). Точные количественные расчеты зависят от конкретного вида ямы. Например, если потенциал содержит только особенность, то все результаты получаются из (6), (7) и (9) при $l'_{\text{кл}} = 0$. Подобные выводы можно сделать и при другом расположении особенностей.

3. Q-решение и G-оператор

Волновую функцию стационарного состояния справа от особой точки потенциала с $x=0$ можно записать так:

$$\Psi(x) = C_2 Q_2(x) + D_2 Q_2^*(x), \quad (16)$$

где $Q(x)$ — решение уравнения Шредингера, переходящее вдали от точки поворота и особой точки потенциала в классически доступной области в квазиклассическое решение обычного приближения

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_{b_1}^x k dx\right), \quad (17)$$

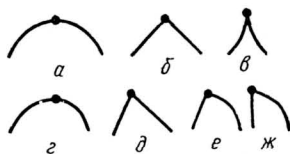


Рис. 3.

при $E < 0$ b_2 — точка поворота, а при $E > 0$ $b_2 = 0$. Вронскиан $Q^*(x)Q'(x) - Q(x)Q^{*'}(x) = 2i$. Обозначения параметров Q-решения

$$\varphi' = \arg Q'(0), \quad \varphi = \arg Q(0), \quad \Delta = \varphi' - \varphi, \quad \xi = \left| \frac{Q'(0)}{Q(0)} \right|. \quad (18)$$

Если классическое движение с данной энергией может происходить по обе стороны от особой точки потенциала (внутренняя особенность, рис. 3), то слева от особой точки Q-решение можно выразить через соответствующее зеркальному отражению потенциала $\tilde{U}(x) = U(-x)$ решение $\tilde{Q}(x)$, определенное при $x > 0$,

$$\Psi(x) = C_1 Q_1(x) + D_1 Q_1^*(x), \quad Q_1(x) = \tilde{Q}_1^*(-x) \exp\left(i \int_{b_0}^{b_1} k dx\right), \quad x < 0. \quad (19)$$

Здесь b_1 — точка поворота, ближайшая к особой точке потенциала слева, или $b_1 = 0$ при $E > 0$, а b_0 — следующая точка поворота.

Связь выражений (16) и (19) волновой функции по обе стороны от особой точки потенциала можно задать матрицей G перехода через особенность

$$\begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

элементы которой, записанные в форме

$$\begin{aligned} G_{21} &= G_{12}^* = |G_{21}| \exp \left(i \int_{b_0}^{b_1} k dx + i\varphi_{21} \right), \\ G_{22} &= G_{11}^* = |G_{22}| \exp \left(-i \int_{b_0}^{b_1} k dx + i\varphi_{22} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

выражаются через параметры Q -решения (18) из условия непрерывности волновой функции и ее производной:

$$\begin{aligned} |G_{22}|^2 &= \frac{\left(\cos \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{2} \right)^2 + \frac{1}{4\xi_1 \xi_2} (\xi_1 - \xi_2)^2}{\sin \Delta_1 \sin \Delta_2}, \quad |G_{22}|^2 - |G_{21}|^2 = 1, \\ \varphi_{21} &= \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} (\varphi'_2 + \varphi_2 - \varphi'_1 - \varphi_1) + \operatorname{arctg} \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{\xi_2 + \xi_1} \operatorname{tg} \frac{\Delta_2 + \Delta_1}{2} \right), \\ \varphi_{22} &= -\frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} (\varphi'_2 + \varphi_2 + \varphi'_1 + \varphi_1) + \operatorname{arctg} \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{\xi_2 + \xi_1} \operatorname{tg} \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{2} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Для симметричной особенности ($\varphi'_1 = \varphi'_2 = \varphi'$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$, $\xi_1 = \xi_2$)

$$|G_{22}|^2 = (\operatorname{cosec} \Delta)^2, \quad \varphi_{21} = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_{22} = \varphi' + \varphi - \frac{\pi}{2}. \quad (23)$$

При критической энергии $E=0$ Q -решение для степенного потенциала для всех l связано с функциями Ганкеля первого рода $H_p^{(1)}(y)$

$$\begin{aligned} Q_0(\lambda) &= \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta} \right)^{\frac{1}{2(l+2)}} \left(\frac{\pi z}{l+2} \right)^{\frac{1}{2}} H_1^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right) \exp \left[i \frac{\pi(l+4)}{4(l+2)} \right], \\ z &= x \frac{2m\beta}{\hbar^2}^{\frac{1}{l+2}}, \end{aligned} \quad (24)$$

с основными параметрами Q -решения

$$\begin{aligned} \varphi'_0 &= \frac{\pi(3l+4)}{4(l+2)}, \quad \varphi_0 = -\frac{\pi l}{4(l+2)}, \quad \Delta_0 = \pi - \frac{\pi}{l+2}, \\ \xi_0 &= \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} \frac{\pi(l+2)^{\frac{l}{l+2}}}{\sin \frac{\pi}{l+2} \Gamma^2 \left(\frac{1}{l+2} \right)}, \end{aligned} \quad (25)$$

а вблизи критической энергии вычисления дают такие результаты:

$$\varphi' = \varphi_0' + f(\lambda) - \frac{1}{2} [\chi_2(\lambda) + \chi_1(\lambda)], \quad \varphi = \varphi_0 + f(\lambda) + \frac{1}{2} [\chi_2(\lambda) - \chi_1(\lambda)], \quad (26)$$

$$\Delta = \Delta_0 - \chi_2(\lambda), \quad \xi = \xi_0 \left[1 - \lambda \frac{\cos \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} \right] + O(\lambda^2),$$

где

$$f(\lambda) = \begin{cases} \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \frac{\left(\sin \frac{\pi}{l}\right)^{\Theta(-\lambda)}}{l+2} B\left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l}\right), & l > 2, \\ -\frac{\lambda}{4} \ln \frac{|\lambda|}{2e}, & l = 2, \\ -\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda), & l = 1, \end{cases}$$

$$\chi_1(\lambda) = \begin{cases} \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{2\pi}{l+2} \cos \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} + O(\lambda^2), & l > 2, \\ -\frac{\lambda}{2} \left[\frac{\pi}{2} + \ln 2 + \Psi(1/4) \right] + O(\lambda^3), & l = 2, \\ -\lambda \frac{3^{1/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} + O(\lambda^2), & l = 1, \end{cases} \quad (27)$$

$$\chi_2(\lambda) = \lambda \frac{\sin \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} + O(\lambda^2).$$

4. Структура спектра в потенциальной яме с внутренней особенностью

Волновая функция стационарного состояния частицы в потенциальной яме, состоящей из двух ямок, разделенных барьером - особенностью, в соответствии с (1), (16), (17) и (19) вдали от особых точек имеет вид в

левой ямке $\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_{b_2}^x k dx - \alpha_0\right)$, а в правой — $\Psi(x) = \frac{B}{\sqrt{k}} \times$
 $\times \cos\left(\int_x^{b_3} k dx - \alpha_3\right)$. Связь действительных A и B дает G -оператор

$$B = A \left[G_{21} \exp(i\alpha_3 - i\alpha_0 - i \int_2 k dx) + G_{22} \exp(i\alpha_3 + i\alpha_0 - i \int_2 k dx) \right], \quad (28)$$

так что отсюда для определения энергетического спектра получается уравнение, которому, используя (21), можно придать форму

$$\cos(S_1 + S_2 - \varphi_{22}) = -\frac{|G_{21}|}{|G_{22}|} \cos(S_1 - S_2), \quad (29)$$

где

$$S_1 = \int_1 k dx - \alpha_0 + \frac{1}{2} \varphi_{21}, \quad S_2 = \int_2 k dx - \alpha_3 + \frac{1}{2} (\pi - \varphi_{21}),$$

$$\int_1 k dx = \int_{b_0}^{b_1} k dx, \quad \int_2 k dx = \int_{b_2}^{b_3} k dx. \quad (30)$$

Решение для двух ветвей энергетического спектра

$$S_1 + S_2 - \varphi_{22} \pm \arccos \left[\frac{|G_{21}|}{|G_{22}|} \cos(S_1 - S_2) \right] = \pi(2n + 1). \quad (31)$$

Для обычного максимума потенциала (симметричного квадратичного барьера) без граничных особенностей уравнения (29) и (31) переходят в уравнения, полученные в работе [1], а для вырожденного случая (одинаковые ямки) — в работе [2].

Параметры уравнения для спектра связаны с характеристиками рассеяния на разделяющем ямки барьере: коэффициент отражения

$$R = \frac{|G_{21}|^2}{|G_{22}|^2}, \quad (32)$$

а по φ_{21} и φ_{22} можно определить время прохождения пакета стационарных состояний

$$t^{\text{прох}} = t^{\text{кл}} - \hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE} \quad (33)$$

и отражения при падении слева и справа

$$t_1^{\text{отр}} = t_1^{\text{кл}} - \hbar \frac{d}{dE} (\varphi_{22} - \varphi_{21}), \quad t_2^{\text{отр}} = t_2^{\text{кл}} - \hbar \frac{d}{dE} (\varphi_{22} + \varphi_{21}), \quad (34)$$

где $t^{\text{кл}}$ — соответствующее классическое время движения частицы.

Из (31) следует, что энергетическая плотность спектра в отдельных ветвях определяется характерными «квантовыми» периодами колебаний $\tau^{(1,2)}$ (верхние индексы — номера ветвей, нижние — ямок):

$$\hbar \frac{d\eta^{(1,2)}}{dE} = \tau^{(1,2)} = \frac{\tau_1^{\text{кл}} + \tau_2^{\text{кл}}}{2} - \hbar \frac{d}{dE} \{ \alpha_0 + \alpha_3 + \varphi_{22} \mp$$

$$\mp \arccos \left[\frac{1}{R} \cos(S_1 - S_2) \right] \}, \quad (35)$$

где $\tau_1^{\text{кл}}$ и $\tau_2^{\text{кл}}$ — классические периоды колебаний в отдельных ямках, а расстояние между уровнями энергии — характерными частотами

$$\Delta E^{(1,2)} = \hbar \omega^{(1,2)}, \quad \omega^{(1,2)} = \frac{2\pi}{\tau^{(1,2)}}. \quad (36)$$

Полная плотность спектра связана с периодом колебаний проходящей сквозь барьер части пакета (33) при учете граничного отражения следующим образом:

$$h \frac{dn}{dE} = h \frac{dn^{(1)}}{dE} + h \frac{dn^{(2)}}{dE} = \tau^{\text{прох}} = \tau_1^{\text{кл}} - 2h \frac{d\alpha_0}{dE} + \tau_2^{\text{кл}} - 2h \frac{d\alpha_3}{dE} - 2h \frac{d\varphi_{22}}{dE}. \quad (37)$$

При больших энергиях, когда отражение от барьера внутри ямы мало, $R \ll 1$, $\arccos[\sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)] = \frac{\pi}{2} - \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)$, а ветви поочередно заполняют систему уровней в полной яме

$$\int_1 kdx + \int_2 kdx - \alpha_0 - \alpha_3 - \varphi_{22} = \begin{cases} 2n\pi + \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2), \\ (2n+1)\pi - \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2), \end{cases} \quad (38)$$

так что первая ветвь соответствует уровням с четным номером, а вторая — с нечетным, с малым поправочным сдвигом. Плотность спектра в ветвях почти одинакова

$$h \frac{dn^{(1,2)}}{dE} = \frac{1}{2} \tau^{\text{прох}} \pm \left[\frac{1}{2} (\tau_1^{\text{отр}} - \tau_2^{\text{отр}}) \sqrt{R} \sin(S_1 - S_2) - \hbar \frac{d\sqrt{R}}{dE} \cos(S_1 - S_2) \right]. \quad (39)$$

При малых энергиях (глубокое туннелирование) коэффициент отражения близок к единице, $\eta = \arccos[\sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)] - \arccos[\cos(S_1 - S_2)]$ — очень малая величина, и для двух ветвей спектра получается характерное чередование застройки системы уровней параметрами отдельных ямок [1]: если целая часть $\frac{S_1 - S_2}{\pi}$ четная, т. е. $\left[\frac{S_1 - S_2}{\pi} \right] = 2n'$, то первая ветвь определяется параметрами первой ямы по формуле

$$\int_1 kdx = \pi \left(n + n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_0 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} - \varphi_{21}) - \frac{1}{2} \eta,$$

а вторая — второй

$$\int_2 kdx = \pi \left(n - n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_3 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} + \varphi_{21} - \pi) + \frac{1}{2} \eta, \quad (40)$$

если же $\left[\frac{S_1 - S_2}{\pi} \right] = 2n' - 1$, то наоборот для первой ветви

$$\int_1 kdx = \pi \left(n - n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_3 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} + \varphi_{21} - \pi) - \frac{1}{2} \eta,$$

а для второй

$$\int_1^{\infty} k dx = \pi \left(n + n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_0 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} - \varphi_{21}) + \frac{1}{2} \eta. \quad (41)$$

Вблизи критической энергии можно разложить параметры уравнения ветвей спектра по отклонению энергии от критического значения $E=0$. Возможные расходимости классических периодов колебаний $\tau_1^{\text{кл}}$ и $\tau_2^{\text{кл}}$ при критической энергии компенсируются за счет граничных α_0 , α_3 и внутренних фаз φ_{21} , φ_{22} , что приводит к конечным «квантовым» периодам, определяющим плотность спектра, которая отличается от предсказываемой (14), а уровни энергий имеют вид

$$E_n^{(1,2)} = \hbar \omega_0^{(1,2)} \left\{ n - n_0 \mp \frac{1}{2\pi} \arccos [V \bar{R}_0 \cos (S_1^0 - S_2^0)] \right\}, \quad (42)$$

n_0 удовлетворяет уравнению $S_1^0 + S_2^0 - \varphi_{22}^0 = \pi(2n_0 + 1)$. Плотность спектра и частоты определяются из (35)–(37) при $E=0$, а взаимное расположение ветвей при близких частотах из (42)

$$E_n^{(2)} - E_n^{(1)} = \frac{\hbar \omega_0}{\pi} \arccos [V \bar{R}_0 \cos (S_1^0 - S_2^0)]. \quad (43)$$

Для симметричной степенной особенности (рис. 3, а—в) из (32) и (23) коэффициент отражения

$$R = \cos^2 \left(\frac{\pi}{l+2} + \chi_2 \right), \quad (44)$$

$\varphi_{21} = \frac{\pi}{2}$, а $\varphi_{22} = 2f(\lambda) - \chi_1(\lambda)$, $\chi_{1,2}$ и f определяются (27), и из (42)

$$E_n^{(1,2)} = \hbar \omega_0^{(1,2)} \left\{ n - n_0 \mp \frac{1}{2\pi} \arccos \left[\cos \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) \right] \right\}. \quad (45)$$

Соответствующие частотам периоды

$$\begin{aligned} \tau_0^{(1,2)} = & \frac{\tau_1^{\text{отр}} + \tau_2^{\text{отр}}}{2} \pm \\ & \pm \frac{\hbar \frac{d\chi_2}{dE} \sin \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1^{\text{отр}} - \tau_2^{\text{отр}}}{2} \cos \frac{\pi}{l+2} \sin (S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{1 - \left[\cos \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) \right]^2}} \end{aligned} \quad (46)$$

выражены через периоды отражения для отдельных ямок по формулам (2) и (36)

$$\tau^{\text{отр}} = \tau^{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\alpha}{dE} - 2\hbar \frac{df}{dE} + \hbar \frac{d\chi_1}{dE}. \quad (47)$$

Например, для симметричной квадратичной особенности

$$\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) + \frac{\pi}{4} \right] \pm \frac{\sqrt{\frac{2m}{\beta} \frac{\pi}{4} \cos(S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1' - \tau_2'}{2} \sin(S_1^0 - S_2^0)}}{\sqrt{2 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} + \frac{\tau_1' + \tau_2'}{2}, \quad (48)$$

и, если время движения вне особенности $\tau_1' + \tau_2' \approx \sqrt{\frac{2m}{\beta}}$, периоды почти одинаковы и неклассичны: $\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \ln Z$, а для $\tau_{(1,2)}' \ll \sqrt{\frac{2m}{\beta}}$

$$\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) + \frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi}{4} \frac{\cos(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{2 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} \right]. \quad (49)$$

Для симметричной линейной особенности

$$\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[\sqrt[3]{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{8\pi} \right] \pm \frac{\left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \sqrt[3]{3} \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} \cos(S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1' - \tau_2'}{2} \sin(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{4 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} + \frac{\tau_1' + \tau_2'}{2} \quad (50)$$

при $\tau_1' + \tau_2' \approx \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3}$ почти одинаковы и близки к классическому $\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \sqrt[3]{Z}$, а поправки неклассичны; при $\tau_{1,2}' \ll \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3}$

$$\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left| \sqrt[3]{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{8\pi} \left[1 \mp \frac{\sqrt[3]{3} \cos(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{4 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} \right] \right|. \quad (51)$$

В (49) и (51) периоды ветвей изменяются в зависимости от $S_1^0 - S_2^0$ от значений, соответствующих особенности у непроницаемой стенки (7) и (9), до значений для границы с условием $\Psi'(0) = 0$.

Таким же образом на основе (22), (26) и (27) исследуется структура спектра и в случае несимметричных внутренних особенностей (рис. 3, г, д — одностепенные особенности, е — разностепенные, ж — скачок и степенной склон).

В случае вырождения первая ветвь спектра принадлежит четным состояниям, а вторая — нечетным, а по отношению к отдельной ямке первая ветвь соответствует особенности с граничным условием $\Psi'(0) = 0$, вторая — особенности с условием непроницаемости $\Psi(0) = 0$, так что свойства спектра определяются формулами (3) — (12).

Автор выражает благодарность И. М. Лифшицу и М. И. Каганову за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН, 78, 411, 1962.
2. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ, 33, 387, 1957.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступила в редакцию
29.1 1973 г.

ON QUASI-CLASSICAL MOTION IN SPECIAL CASES

V. V. Ulyanov

Summary

Quasi-classical motion of a particle is considered in potential fields with such singularities as maxima, salient points, cusps, sultuses, etc. It is shown that within a certain «critical» energy range the wave packets reflection and energy spectrum structure in a potential well with boundary and internal singularities may substantially differ from those usual for the quasi-classical approximation. The results of calculations for power potentials are presented.

О СТРУКТУРЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

В. В. Ульянов

1. Если движение частицы происходит в потенциальном поле $U(x)$, состоящем из $N-1$ одинаковых ямок и двух граничных, разделенных N одинаковыми барьерами, то методами работы [1], сочетающими точное решение вблизи особых точек потенциала с квазиклассическим приближением вдали от особенностей, зонному решению уравнения для уровней энергии можно придать форму правил квантования, имеющих при $N \rightarrow \infty$ вид

$$\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22} + (-1)^{s+1} \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (1)$$

где $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$, s нумерует зоны, p — приведенный квазиимпульс, интеграл берется при $E < 0$ (энергия отсчитывается от критического значения, соответствующего вершине барьера) между точками поворота в отдельной ямке и при $E > 0$ между точками вершин соседних барьеров, расстояние между которыми равно L , T — коэффициент прозрачности отдельного барьера, а φ_{22} — фазовый параметр оператора перехода через отдельный барьер (см. [1]).

2. Средние энергии зон \bar{E}_s удовлетворяют уравнению $\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22}$ и соответствуют квазиуровням в отдельной ямке между двумя барьерами. Энергетическая плотность зон и расстояние между их средними энергиями определяются «квантовыми» [1] периодом τ и частотой ω отражаемой части пакета стационарных состояний в отдельной ямке, переходящими при малых энергиях в классические для колебаний в отдельной ямке, а при больших энергиях — для условного колебания между точками вершин соседних барьеров:

$$\hbar \frac{ds}{dE} = \tau = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE}, \quad \bar{E}_{s+1} - \bar{E}_s = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}, \quad \hbar = 2\pi\hbar. \quad (2)$$

Из уравнений (1) и (2) получаем закон дисперсии

$$E_s(p) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar\omega \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (3)$$

где можно считать, что $\omega = \omega(\bar{E}_s)$ и $T = T(\bar{E}_s)$, так как с изменением энергии в пределах одной зоны эти величины очень мало изменяются (при всех энергиях). Ширина зоны $\Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar\omega \arcsin \sqrt{T}$.

3. При малых энергиях (глубокое туннелирование) T экспоненциально мал, что приводит к обычному результату для зон

$$E_s(p) = E_s(0) + \frac{2(-1)^s}{\pi} \hbar\omega \sqrt{T} \left(\sin \frac{pL}{2\hbar} \right)^2, \quad \Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar\omega \sqrt{T}. \quad (4)$$

При больших энергиях (сильное надбарьерие) $T \rightarrow 1$, щель между зонами

$$\delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \sqrt{1 - T},$$

а закон дисперсии переходит в квадратичный (в схеме расширенных зон).

4. Вблизи критической энергии $E=0$ (мелкое туннелирование и слабое надбарьерие) из уравнения (1) следует, что

$$E_s(p) = \hbar \omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \left(\sqrt{T_0} \cos \frac{pL}{\hbar} \right) \right], \quad (5)$$

где s_0 удовлетворяет уравнению $\left(\int k dx - \Phi_{22} \right)_{E=0} = \pi \left(s_0 + \frac{1}{2} \right)$, а частоты определяются из (2) при $E=0$. Для степенных симметричных „шапок“ барьеров $U(x) = -\beta |x|^l$ с достаточно большими размерами X (т. е. при

$X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} = Z \gg 1$) $T_0 = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2$, $\Phi_{22}^0 = 0$, и формула (5) справедлива,

если величина критического диапазона энергий $\left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}} \gg |\bar{E}_s|$. При этом

$\Delta E_s = \frac{2\hbar\omega_c}{l+2}$. В частности, для $l=2$ (максимум) число зон в критическом диапазоне энергий оказывается порядка $\ln Z$, а для $l=1$ (излом) — порядка \sqrt{Z} .

5. При конечном N уровни энергии в зонах

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left[\sqrt{T} \cos \left(\frac{\pi n}{N} + \delta \right) \right], \quad (6)$$

$$\delta = -\frac{1}{N} \arctg \frac{c \sin \frac{\pi n}{N}}{1 - c \cos \frac{\pi n}{N}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1,$$

где отброшены члены порядка N^{-2} , а величина

$$c = \frac{\sqrt{T} \cos (S_1 + S_2 - \int k dx)}{\sqrt{1 - T} \cos (S_1 - S_2) + \cos (S_1 + S_2 - \Phi_{22})}$$

учитывает влияние граничных ямок и граничных условий в них (параметры S_1 и S_2 из [1]). Граничные уровни образуют две ветви энергетического спектра, исследование которых аналогично проведенному в [1] для случая потенциальной ямы с одной внутренней особенностью.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Ульянов, УФЖ, 18, 1848, 1973.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
25.XII 1973 г.

ПРО СТРУКТУРУ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ЗОН В ОДНОВИМІРНОМУ ВИПАДКУ

В. В. Ульянов

1. Якщо рух частинки відбувається у потенціальному полі $U(x)$, яке складається з $N-1$ однакових ямок та двох межових, відокремлених N однаковими бар'єрами, то методами роботи [1], що поєднують точний розв'язок поблизу особливих точок потенціалу з квазікласичним наближенням далеко від особливостей, зонному розв'язку рівняння для рівнів енергії можна надати форми правил квантування, які мають при $N \rightarrow \infty$ вигляд

$$\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22} + (-1)^{s+1} \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (1)$$

де $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$, s нумерує зони, p — зведений квазіімпульс, інтеграл береться при $E < 0$ (енергія відраховується від критичного значення, яке відповідає вершині бар'єра) між точками повороту в окремій ямці та при $E > 0$ між точками вершин сусідніх бар'єрів, відстань між якими дорівнює L , T — коефіцієнт прозорості окремого бар'єра, а φ_{22} — фазовий параметр оператора переходу крізь окремий бар'єр (див. [1]).

2. Середні енергії зон \bar{E}_s задовольняють рівняння $\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22}$ і відповідають квазірівням в окремій ямці між двома бар'єрами. Енергетична щільність зон та відстань між їхніми середніми енергіями визначаються «квантовими» [1] періодом τ та частотою ω відбитої частини пакета стаціонарних станів в окремій ямці, що переходять при малих енергіях у класичні для коливань в окремій ямці, а при великих енергіях — для умовного коливання між точками вершин сусідніх бар'єрів:

$$\hbar \frac{ds}{dE} = \tau = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE}, \quad \bar{E}_{s+1} - \bar{E}_s = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}, \quad \hbar = 2\pi\hbar. \quad (2)$$

З рівнянь (1) та (2) одержуємо закон дисперсії

$$E_s(p) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar\omega \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (3)$$

де можна вважати, що $\omega = \omega(\bar{E}_s)$ і $T = T(\bar{E}_s)$, тому що із зміною енергії у межах однієї зони ці величини дуже мало змінюються (при всіх енергіях). Ширина зони $\Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar\omega \arcsin \sqrt{T}$.

3 При малих енергіях (глибоке тунелювання) T експоненціально малий, що приводить до звичайного результату для зон

$$E_s(p) = E_s(0) + \frac{2(-1)^s}{\pi} \hbar\omega \sqrt{T} \left(\sin \frac{pL}{2\hbar} \right)^2, \quad \Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar\omega \sqrt{T}. \quad (4)$$

При великих енергіях (сильне надбар'єр'я) $T \rightarrow 1$, щілина між зонами

$$\delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar\omega \sqrt{1-T},$$

а закон дисперсії переходить у квадратичний (у схемі розширених зон).

4. Поблизу критичної енергії $E=0$ (мілке тунелювання та слабе надбар'єр'я) з рівняння (1) випливає, що

$$E_s(p) = \hbar\omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \left(\sqrt{T_0} \cos \frac{pL}{\hbar} \right) \right], \quad (5)$$

де s_0 задовольняє рівняння $\left(\int k dx - \varphi_{22} \right)_{E=0} = \pi \left(s_0 + \frac{1}{2} \right)$, а частоти ви-

значаються з (2) при $E=0$. Для степеневих симетричних «шапок» бар'єрів $U(x) = -\beta |x|^l$ з досить великими розмірами X (тобто при $X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} =$

$= Z \gg 1$) $T_0 = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2$, $\varphi_{22}^0 = 0$, і формула (5) справедлива, якщо вели-

чина критичного діапазону енергій $\left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}} \gg |\bar{E}_s|$. При цьому $\Delta E_s =$

$= \frac{2\hbar\omega_0}{l+2}$. Зокрема, для $l=2$ (максимум) число зон у критичному діапазоні

енергій виявляється порядку $\ln Z$, а для $l=1$ (злам) — порядку \sqrt{Z} .

5. При скінченному N рівні енергії у зонах

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar\omega \arcsin \left[\sqrt{T} \cos \left(\frac{\pi n}{N} + \delta \right) \right],$$

$$\delta = -\frac{1}{N} \arctg \frac{c \sin \frac{\pi n}{N}}{1 - c \cos \frac{\pi n}{N}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (6)$$

де відкинуто члени порядку N^{-2} , а величина

$$c = \frac{\sqrt{T} \cos (S_1 + S_2 - \int k dx)}{\sqrt{1-T} \cos (S_1 - S_2) + \cos (S_1 + S_2 - \varphi_{22})}$$

враховує вплив межових ямок та межових умов у них (параметри S_1 та S_2 з [1]). Межові рівні утворюють дві вітки енергетичного спектра, дослідження яких аналогічне проведеному в [1] для випадку потенціальної ями з однією внутрішньою особливістю.

ЛІТЕРАТУРА

1. В. В. Ульянов, УФЖ, 18, 1848, 1973.

Харківський держуніверситет
ім. О. М. Горького

Надійшов до редакції
25.XII 1973 р.

УКРАИНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том 25

№ 3

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

КИЕВ — 1980

УДК 530.145

В. В. Ульянов, Ю. А. Косевич

О СТРУКТУРЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ. II

1. В первой части [1] работы нами рассматривалось квазиклассическое описание одномерных энергетических зон в случае достаточно сильных полей. Особое внимание уделялось структуре зон в окрестности максимумов потенциала — критическому диапазону энергий. В этой части работы анализируется структура одномерных энергетических зон в случае слабых полей. Рассматривается главным образом область низких энергий в приближении слабой связи, физический смысл которого заключается в малости возникающих щелей (полос запрещенных значений энергии) по сравнению с шириной зон. Вычисления проведены методом теории возмущений в сочетании с гармоническим анализом профиля поля. Кратко разбирается случай сильной связи. Общие результаты иллюстрируются на конкретных моделях потенциальных полей, для которых возможно точное решение, что позволяет судить об эффективности используемых аппроксимаций.

Обычно основное внимание (см., например, [2, 3]) уделяется структуре зонного спектра в трехмерном периодическом поле (электроны в металле). Одномерная же задача при этом если и упоминается, то лишь для демонстрации общих квантовых закономерностей формирования зон [2, 4, 5]. В настоящее время, когда интерес к системам низкой размерности, вызванный экспериментальными и техническими достижениями в области исследования и применения тонкопленочных и нитевидных материалов, все больше возрастает, задача о структуре энергетических зон в одномерном случае приобретает самостоятельное значение, выходя за рамки методической проблемы. В связи с этим представляется целесообразным более детально обсудить специфические особенности одномерного зонного спектра энергии, в частности, в слабом поле.

2. Закон дисперсии вблизи дна ($|p| \ll \pi\hbar/L$) самой низкоэнергетической зоны, которую будем в дальнейшем называть нулевой зоной, можно записать в виде

$$E(p) = E(0) + p^2/2M + \alpha p^4 + O(p^6). \quad (1)$$

В силу известного свойства $E(-p) = E(p)$ в (1) входят только четные степени квазиимпульса p . Величина $E(0)$ определяет положение дна зоны, т. е. сдвиг границы спектра энергии по сравнению со случаем свободного движения, когда $E(0) = 0$, $M = m$ и $\alpha = 0$. Обратная эффективная масса у дна нулевой зоны получает добавку δM^{-1} . Коэффициент α дает вклад члена четвертого порядка в разложении энергии по степеням квазиимпульса.

Для получения отмеченных выше параметров зонной структуры удобно представить потенциальную энергию в виде ряда Фурье:

$$U(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{2\pi i l x/L}, \quad U_l = \frac{1}{L} \int_L dx U(x) e^{-2\pi i l x/L}. \quad (2)$$

В первом приближении теории возмущений [5, 6] получается общее смещение спектра энергии на величину среднего по невозмущенному движению значения налагаемого поля $E^{(1)} = (1/L) \int_L U(x) dx = \bar{U}$. Во втором приближении поправка к энергии с учетом свойств ряда Фурье (2) может быть преобразована к выражению $E^{(2)} = -m \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / [(\pi \hbar l / L)^2 - p^2]$. Его разложение по степеням p приводит к закону дисперсии (1) и дает следующие результаты для параметров нулевой зоны с точностью до членов порядка U^2 включительно:

$$E(0) = \bar{U} - m (L/\pi \hbar)^2 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^2, \quad (3)$$

$$\delta M^{-1} = -2m (L/\pi \hbar)^4 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^4, \quad \alpha = -m (L/\pi \hbar)^6 \sum_{l=1}^{\infty} |U_l|^2 / l^6.$$

Знак второго слагаемого в выражении для $E(0)$ отрицателен, как и должно быть для квадратичной по возмущению поправки к основному уровню энергии [6], а отрицательный знак величин δM^{-1} и α объясняется тенденцией обратной эффективной массы к уменьшению: внутри нулевой зоны (в слабом поле — вблизи верхнего края этой зоны) она должна обращаться в нуль. Любопытно сравнить закон дисперсии (1) с классической квазирелятивистской зависимостью энергии от импульса $E(p) = mc^2 + p^2/2m - p^4/8m^3c^2 + O(p^6)$. В обоих случаях поправка, включающая p^4 , отрицательна.

Заметим, что структура рядов в формулах (3) определяется видом исходного закона дисперсии. В частности, показатель степени множителя l^{-2} в сумме для $E(0)$ обусловлен квадратичностью невозмущенного закона дисперсии.

Запишем известное [2—5] выражение для щели между $(s-1)$ -й и s -й зонами:

$$\delta E_s = 2|U_s| + O(U^2), \quad s = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Щели образуются в результате расщепления двукратно вырожденных уровней энергии, удовлетворяющих условию брэгговского отражения. В нулевом по величине поля приближении щели расположены при значениях энергии $E_s = \pi^2 \hbar^2 s^2 / 2mL^2$, соответствующих спектру частицы, запертой в отдельной ячейке поля. Вблизи щелей обратная эффективная масса значительно возрастает по абсолютной величине. Так, можно показать, что у верхнего края нулевой зоны

$$M^{-1} = -m^{-1} |U_1|^{-1} (\pi \hbar / L)^2. \quad (5)$$

Возникает вопрос, можно ли аппроксимировать суммы в выражениях (3) слагаемыми с первой гармоникой? Учитывая быструю сходимость рядов в формулах (3) для обычных моделей потенциала, когда $U_l \rightarrow 0$ с ростом l , приходим к выводу, что во всех формулах для оценок (а в большинстве случаев — и для количественных расчетов) можно оставить только первые члены в суммах. Тогда выражения (3) упрощаются:

$$E(0) = \bar{U} - m (L/\pi \hbar)^2 |U_1|^2, \quad \delta M^{-1} = -2m (L/\pi \hbar)^4 |U_1|^2, \\ \alpha = -m (L/\pi \hbar)^6 |U_1|^2. \quad (6)$$

Исключение составляют сингулярные потенциальные модели. Например, в модели δ -образных ям (см. далее) все гармоники одинаковы, так что в формуле (3) для $E(0)$ нужно брать всю сумму, что не составляет, впрочем, труда (см. формулы (9)).

Малым параметром теории является отношение щели между нулевой и первой зонами $\delta E_1 = 2|U_1|$ к ширине невозмущенной нулевой зоны $\Delta E_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Таким образом, необходимо выполнение неравенства $\delta E_1 / \Delta E_0 \ll 1$. Из формул (6) при $\bar{U} = 0$ вытекает оценка $|E(0)| / \Delta E_0 = |\delta M^{-1}| / m^{-1} = (\delta E_1 / \Delta E_0)^2 / 8$, т. е. поправка к массе и сдвиг дна нулевой зоны достаточно малы даже при $\delta E_1 \sim \Delta E_0$. Это дает основание надеяться, что и в случае не очень слабого поля формулы (3) будут справедливы. Анализ конкретных моделей периодического поля подтверждает такое предположение.

Обратим внимание на слабую зависимость величин (3) от деталей профиля поля, поскольку основную роль обычно играют гармоники невысоких порядков. Наиболее стабильным является коэффициент α , далее — добавка к массе, а затем — наиболее подвижный элемент зонной структуры — положение дна зоны. Что касается щелей между зонами, то для щели между нулевой и первой зонами также существенна только первая гармоника потенциала, а для других щелей важны гармоники более высоких порядков — каждая гармоника формирует соответствующую щель (4). Таким образом, незначительное изменение профиля поля (например, сглаживание) слабо сказывается на рассматриваемых параметрах нулевой зоны, а особые точки потенциальной энергии (максимумы, изломы, скачки и пр.) в слабом поле влияют лишь на величину высокоэнергетических щелей и их окрестности (как известно из теории рядов Фурье, если n -я производная потенциала имеет скачок, то $|U_l| \sim 1/l^{n+1}$ при больших l). Особенности поля в рассматриваемом случае оказываются менее существенными, чем в случае сильного поля, где они определяют структуру зон как в критическом диапазоне энергий, так и при больших энергиях (см. [1]).

Очень важным является следующее обстоятельство. Все параметры зонной структуры в рассматриваемом приближении определяются только модулями коэффициентов Фурье $|U_l|$. Фазы гармоник войдут в соответствующие энергетические поправки третьего порядка по величине поля, а также в поправки первого порядка для волновых функций стационарных состояний. Например, у дна нулевой зоны при $p=0$ в первом приближении

$$\Psi_0(x) = 1 - \dot{m} (L/\pi\hbar)^2 \sum_{l=1}^{\infty} l^{-2} |U_l| \cos(2\pi lx/L + \arg U_l).$$

В связи с этой особенностью энергетического спектра интересно решить обратную задачу — восстановление слабого поля по данным структуры зон. Рассмотренные параметры нулевой зоны позволяют найти (наряду с периодом) модули нескольких основных гармоник потенциала, если гармоники достаточно быстро убывают. Модули всех гармоник можно восстановить по величине щелей. Однако фазы гармоник также существенны в воссоздании вида поля. Если же важна только одна гармоника, например $U_1 = |U_1| e^{i\varphi}$, то согласно разложению (2) в случае потенциальной энергии $U(x) = 2|U_1| \cos(2\pi x/L + \varphi)$ фаза влияет лишь на отсчет координаты.

Мы рассмотрели более подробно структуру нулевой зоны (3) у ее дна, когда вычисления ведутся с помощью теории возмущений без вырождения, а также некоторые свойства щелей (4) и окрестности верх-

него края нулевой зоны (5), когда применяется теория возмущений с учетом вырождения. То, что мы ограничились главным образом параметрами нулевой зоны, объясняется, с одной стороны, важностью именно этой области энергий (в случае слабой связи зонный характер спектра наиболее ярко выражен при низких энергиях) и, с другой стороны, возможностью проиллюстрировать основные эффекты при простом расчете.

Подчеркнем, что задача о невозмущенном движении не обязательно должна соответствовать задаче о свободном движении: результаты относятся и к случаю, когда невозмущенное движение относится к квазичастицам вблизи дна (или верхнего края) некоторой зоны (с учетом знака затравочной массы m), т. е. касается электронов и дырок, например, в полупроводниках.

Отметим, что в случае многомерных полей число мер структуры нулевой зоны возрастает. Так, уже при двумерных измерениях возникают тензор обратных эффективных масс и тензор в члене четвертого порядка по компонентам квазимпульса, так что вместо вышерассмотренных одномерных параметров (3) появляются с учетом симметрии указанных тензоров, десять величин.

3. Рассмотрим некоторые точно решаемые модели периодических потенциальных полей. Среди них имеются как двухпараметрические (например, параметрами являются амплитуда поля U_0 и его период L — постоянная «решетки»), так и более сложные (дополнительным параметром служит размер ямы).

Для синусоидальной [7] модели $U(x) = \frac{U_0}{2} \cos \frac{2\pi x}{L}$ с единственной отличной от нуля первой гармоникой $U_1 = U_0/4$ и $\bar{U} = 0$ основные параметры нулевой зоны согласно формулам (3), (4) равны

$$E(0) = -U_0^2 m L^2 / 16 \pi^2 \hbar^2, \quad \delta M^{-1} = -(m^{-1}/8) (m L^2 U_0 / \pi^2 \hbar^2)^2, \quad (7)$$

$$\alpha = -m L^6 U_0^2 / 16 \pi^6 \hbar^6, \quad \delta E_1 = U_0 / 2.$$

В этой модели зависимости щелей более высоких порядков от амплитуды поля степенные [8] ($\delta E_s \sim U_0^s$), например, $\delta E_2 = m L^2 U_0^2 / 16 \pi^2 \hbar^2$. Если к синусоидальному потенциалу будут добавлены небольшие гармоники (обертоны), то это скажется лишь на формировании второй щели и щелей более высоких порядков (да и то при достаточно большой величине обертонов). О точности результатов (7) свидетельствуют численные (табличные) значения параметров уравнения Матье [9] и более детальные разложения в ряды по степеням поля (см., например, [8]).

Близка к синусоидальной и разновидность модели Кронига—Пенни [10] с одинаковыми ширинами ям и барьеров. Для этой модели $\bar{U} = U_0/2$ и отличны от нуля (см. формулу (10) при $L=2a$) только нечетные гармоники $U_{2n+1} = (-1)^n U_0 / (2n+1)\pi$, $n=0, 1, \dots$. Обращение в нуль четных гармоник объясняется, как и в случае модели линейного поля с изломами (см. далее), антипериодичностью потенциала на интервале полупериода (с учетом сдвига отсчета потенциальной энергии).

Далее отметим две модели кусочно-линейного потенциала: с ячейкой $U(x) = 2U_0|x|/L$, $|x| \leq L/2$ («пила» с изломами), где $\bar{U} = U_0/2$ и $U_l = U_0 [(-1)^l - 1] / \pi^2 l^2$, $l \neq 0$, и с ячейкой $U(x) = U_0 x/L$, $|x| < L/2$ («пила» с разрывами), где $\bar{U} = 0$ и $U_l = i(-1)^l U_0 / 2\pi l$, $l \neq 0$. Эти модели допускают точное решение с помощью функций Эйри. Для кусочно-квадратич-

ного поля с ячейками $U(x) = \pm \beta x^2$, $|x| \leq L/2$ также возможно точное решение на основе функций параболического цилиндра.

Подчеркнем, что все упомянутые модели построены на основе ям-ячеек, ширины которых одного порядка с ширинами разделяющих их барьеров. Можно назвать эти модели нелокальными, поскольку ямы отделены друг от друга небольшими промежутками. Сюда же относится особая двухпараметрическая модель локального типа, в которой ямы разделены расстояниями произвольной величины (в приближении слабой связи, однако, не очень большими), — модель δ -образных ям

$$U(x) = -u \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL). \quad (8)$$

Особенность этой модели состоит в том, что все гармоники потенциала одинаковы: $\bar{U} = -u/L$ и $U_l = -u/L$, $l \neq 0$. Это значит, что и щели между зонами в первом приближении равны, а суммы в формулах (3) легко вычисляются и приводят к следующим значениям основных параметров нулевой зоны:

$$E(0) = -u/L - mu^2/6\hbar^2, \quad \delta M^{-1} = -mL^2 u^2/45\hbar^4, \quad \alpha = -mL^4 u^2/945\hbar^6. \quad (9)$$

При расчетах зон для кусочно-линейных (квадратичных) и δ -образных моделей удобно опираться на метод матрицы связи локальных решений [11] (метод оператора перехода через особые точки поля). В случае двухпараметрических потенциальных моделей формулы для основных мер структуры нулевой зоны (например, (7) и (9)) настолько просты, что возникает соблазн получить их непосредственно из соображений размерности (учитывая квадратичную зависимость от величины поля). Однако численные коэффициенты оказываются все же существенными и чувствительными к профилю поля. Хуже поддается такой оценке величина дополнительного сдвига дна нулевой зоны. Лучше всего подходит размерная оценка для определения поправки к массе.

В качестве примера несколько более сложного потенциала с тремя параметрами приведем хорошо известную модель Кронига—Пенни [10] с ячейкой поля

$$U(x) = U_0, \quad |x| < a/2; \quad U(x) = 0, \quad a/2 < |x| < L/2,$$

где гармоники

$$\bar{U} = U_0 a/L, \quad U_l = (U_0/\pi l) \sin(\pi a l/L), \quad l \neq 0. \quad (10)$$

Случай δ -образных ям (8) соответствует предельному переходу в модели Кронига—Пенни (с учетом переноса начала отсчета энергии в максимумы барьеров), когда ширина ям уменьшается, а глубина увеличивается при постоянной величине площади ям. Обычно же, как и в работе Кронига и Пенни [10], рассматривается другой предельный случай с устремлением высот барьеров и их ширин соответственно к бесконечности и нулю — «гребенка» Дирака (модель δ -барьеров) [3, 4].

С точки зрения гармонического анализа двухпараметрические модели промежуточные между предельными случаями с одной гармоникой (синусоидальный потенциал) и с равномерным распределением по гармоникам (модель δ -образных ям). Сравнение приближенных формул (3) с результатами точного расчета для этих предельных моделей позволяет судить об эффективности аппроксимаций. Из анализа сле-

дует, что, даже если первая щель равна половине ширины невозмущенной нулевой зоны, относительные ошибки по модулю невелики: наименьшая возникает при расчете обратной эффективной массы (не более 0,5%), бóльшая — при расчете положения дна нулевой зоны (не более 2%), еще бóльшая — при расчете первой щели (от 0,1% для синусоиды до 7% для δ -модели), самая большая — при расчете коэффициента α (около 10%).

Таким образом, формулы (3), (4) хорошо аппроксимируют соответствующие меры структуры зонного спектра даже в случае промежуточных (не очень слабых) полей, когда первая щель порядка ширины невозмущенной нулевой зоны.

4. Модель δ -образных ям (8) заслуживает особого внимания. Она описывает основные черты целого класса полей локального типа, образованных слабыми (не только узкими, но и мелкими) потенциальными ямками произвольного профиля. Пусть при этом расстояние между ямками не очень велико: $a \ll L \ll \kappa_0^{-1}$, где $\kappa_0 = (m/\hbar^2) \int_a U(x) dx$ характеризует пространственный «ореол» — расстояния, на которых затухает волновая функция связанного стационарного состояния частицы в отдельной изолированной ямке шириной a . Тогда параметры зонного спектра соответствуют слабой связи и определяются, как нетрудно убедиться, формулами (9) для модели δ -образных ям с $u = \int_a U(x) dx$. При очень большом расстоянии между ямками ($L \gg \kappa_0^{-1}$) ситуация соответствует сильной связи: нулевая зона получается за счет экспоненциально малого уширения единственного уровня энергии, существующего в сколь угодно слабой одномерной ямке. С помощью метода функций Грина [12, 13] (переход к интегральной форме уравнения Шредингера с последующим использованием вариационных оценок) можно показать, что в этом случае для нулевой зоны закон дисперсии имеет вид

$$E_0(p) = -|E_0| [1 + 4e^{-\kappa_0 L} \cos(pL/\hbar) + O(e^{-2\kappa_0 L})], \quad (11)$$

где $|E_0| = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$ — энергия связи частицы в отдельной изолированной ямке [6]. Так же обстоит дело и в случае скомпенсированного поля с $\int_a U(x) dx = 0$, когда наряду с областями притяжения имеются области отталкивания. Частица в изолированной ячейке такого потенциала по-прежнему находится в связанном состоянии, а все сказанное относительно слабого поля притяжения, включая формулу (11), остается справедливым, если положить $\kappa_0 = -(m^2/\hbar^4) \iint_a dx dx' U(x) U(x') |x - x'|$.

Для модели δ -образных ям формула (11) вытекает непосредственно из точного дисперсионного уравнения

$$\operatorname{ch} \kappa L - (\kappa_0/\kappa) \operatorname{sh} \kappa L = \cos(pL/\hbar), \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}, \quad E < 0, \quad (12)$$

если $\kappa L \gg 1$. Сопоставляя результаты приближения сильной связи с точным решением для δ -модели (12), убеждаемся, что формула (11) с достаточно высокой точностью описывает структуру нулевой зоны вплоть до промежуточных значений $L \sim \kappa_0^{-1}$, когда ширина этой зоны становится порядка энергии связи для изолированной ямы.

Метод функций Грина оказывается весьма эффективным при теоретическом исследовании влияния различных возмущений периодического потенциала (дефектов, примесей, электрических и магнитных полей [13]), а также энергетического спектра неупорядоченных систем [14].

Добавим, что, хотя модель δ -образного потенциала пригодна для

описания короткодействующего поля только в одномерном случае, существуют ее обобщения на многомерные случаи. Так, аналог периодической δ -модели в трехмерном случае исследовался в работе [15], а линейные цепочки ям малого радиуса в трехмерном пространстве и другие подобные вопросы рассмотрены в монографии [16].

5. В заключение еще раз обратим внимание на тот факт, что приближению слабой связи соответствуют поля с малой амплитудой и с не очень большим периодом. Если же период достаточно велик, то реализуется случай сильной связи. В частности, для локализованных полей притяжения это означает, что малые потенциальные ямки будут отделены слабопроницаемыми барьерами (в области $E < 0$ есть лишь одна экспоненциально узкая зона), а поля нелокального типа при этом могут быть только сильными: и барьеры, и ямы велики (применимо квазиклассическое приближение). Таким образом, для нелокальных полей условие слабого поля имеет вид $mL^2U_0 \ll \hbar^2$, а для локальных — $ma^2U_0 \ll \hbar^2$ (если к тому же $maLU_0 \gg \hbar^2$, то возникает сильная связь).

Любопытно сопоставить результаты теории возмущений с квазиклассическими. Например, формула для щелей $\delta E_s = 2|U_s|$ согласуется с соответствующим квазиклассическим [1] выражением $\delta E_s = (2/\pi)\hbar\omega(E_s)\sqrt{R(E_s)}$ при малых коэффициентах отражения R от отдельного барьера. Ширина s -й зоны определяется в нулевом приближении теории возмущений величиной $\Delta E_s = (2s+1)\pi^2\hbar^2/2mL^2$, что также при больших энергиях близко к квазиклассическому результату [1] $\Delta E_s = (2/\pi)\hbar\omega(E_s)$, где $\omega(E)$ — частота классических условных колебаний между вершинами соседних барьеров.

Заметим также, что оба подхода — квазиклассический и слабого поля (как для слабой, так и для сильной связи) — позволяют найти параметры зонной структуры для произвольного профиля поля. Они отличаются достаточной простотой и наглядностью конечных формул и тех переменных, через которые выражены искомые величины.

Исследуемые в работе вопросы относятся к теории энергетических зон частиц, движущихся в плоскостных структурах, в частности в средах с искусственной периодичностью (пленочных слоях, так называемых сверхрешетках [17] и т. п.), где интересующая нас ветвь движения сквозь слои отделяется от ветвей движения вдоль плоских слоев. Кроме того, областью приложения может служить распространение возбуждений (квазичастиц) внутри каналов (проволок, нитей) с достаточно малыми поперечными размерами и периодическими свойствами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ульянов В. В. О структуре энергетических зон в одномерном случае. — УФЖ, 1974, 19, № 5, с. 867—868; О прозрачности цепочки одинаковых потенциальных барьеров. — УФЖ, 1974, 19, № 12, с. 2046—2048.
2. Абрикосов А. А. Введение в теорию нормальных металлов. — М.: Наука, 1972. — 288 с.; Давыдов А. С. Теория твердого тела. — М.: Наука, 1976. — 640 с.
3. Бете Г., Зоммерфельд А. Электронная теория металлов. — М.—Л.: Гостехиздат, 1938. — 316 с.
4. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. — М.: Наука, 1978. — 448 с.
5. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика (с задачами). — М.: Наука, 1976. — 336 с.
6. Landau Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974. — 752 с.
7. Morse P. M. The quantum mechanics of electrons in crystals. — Phys. Rev., 1930, 35, N 11, p. 1310—1324.
8. Meixner J., Schäfer F. W. Mathieu'sche Funktionen und Sphäroidfunktionen. — Berlin: Springer-Verlag, 1954. — 414 S.
9. Таблицы для вычисления функций Маттье. — М.: Изд-во ВЦ АН СССР, 1967. — 279 с.

10. *Kronig R., Penney W. G.* Quantum mechanics of electrons in crystal lattices.—Proc. Roy. Soc., 1931, A130, N 814, p. 499—513.
11. *Ульянов В. В.* О квазиклассическом движении в особых случаях.—УФЖ, 1973, 18, № 11, с. 1848—1859.
12. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела.—М.: Мир, 1974.—472 с.
13. *Каллуэй Дж.* Теория энергетической зонной структуры.—М.: Мир, 1969.—360 с.
14. *Лифшиц И. М.* О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем.—УФН, 1964, 83, № 4, с. 617—663; *Мотт Н., Дэвис Э.* Электронные процессы в некристаллических веществах.—М.: Мир, 1974.—472 с.; *Эфрос А. Л.* Локализация электронов в неупорядоченных системах.—УФН, 1978, 126, № 1, с. 41—65.
15. *Малеев С. В.* О трехмерном обобщении модели Кронига — Пенни.—ФТТ, 1965, 7, № 10, с. 2990—2994.
16. *Демков Ю. Н., Островский В. Н.* Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике.—Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975.—240 с.
17. *Шик А. И.* Сверхрешетки — периодические полупроводниковые структуры.—ФТП, 1974, 8, № 10, с. 1841—1864; *Голубев Л. В., Леонов Е. И.* Сверхрешетки.—М.: Знание, 1977.—61 с.; *Эсаки Л.* Путешествие в страну туннелирования.—УФН, 1975, 116, № 4, с. 569—583.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступила в редакцию
26.III 1979 г.

V. V. Ulyanov, Yu. A. Kosevich

ON THE STRUCTURE OF ENERGY BANDS FOR A UNIDIMENSIONAL CASE. II

Summary

Investigations of unidimensional energy bands, which have been begun by one of the authors, are continued. Properties of the band spectrum are considered for a case of weak fields at low energies: specific peculiarities of band parameters in the weak coupling approximation, the inverse problem of field restoration by means of the band structure data, the dispersion law in a field formed by localized domains of attraction (a case of strong coupling). The approximation efficiency is evaluated by comparison with exactly solvable models of periodic potential fields.

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

2·75

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

Полученные результаты позволили проанализировать зависимость величины накапливаемого заряда от приложенного напряжения при фиксированном времени. Из рис. 3 видно, что заряд для хроматографического бензола в малых полях до 1 В растет по закону $Q = V^{1,45}$ при $t = 2-10$ сек. Увеличение напряжения до 60 В приводит к линейной зависимости заряда от напряжения, что наблюдается и для криоскопического бензола во всем исследуемом интервале полей. Установленные экспериментальные закономерности соответствуют теории эстафетного механизма проводимости, которая использовалась для неорганических диэлектриков [5] и позволяет определить величину потенциального барьера d , обусловленного объемным зарядом, а также величину подвижности носителей. Для исследуемого бензола $d = 5 \cdot 10^{-3} - 7 \cdot 10^{-3}$ см при малых полях $V = 0,6$ В, а затем уменьшается с ростом поля и временем его приложения. Величина подвижности имеет порядок $\mu = 1,4 \cdot 10^{-2}$ см²/в · сек при полях $V = 2$ В и уменьшается до $5 \cdot 10^{-4}$ см²/в · сек при повышении поля до 20 В. Дальнейший рост поля до 2330 В/см приводит к малому значению $\mu = 0,3 \cdot 10^{-5}$ см²/в · сек.

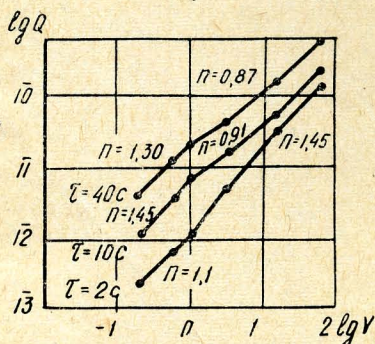


Рис. 3. Зависимость $\lg Q$ от $\lg V$ для хроматографического бензола ($S = 1,13$ см²)

которого лежит перенос заряда локальными центрами, что приводит к возникновению потенциального барьера на аноде. В связи с этим ток ограничен пространственным зарядом не только в объеме, но и барьером на аноде, который изменяет ток во времени, объясняет временной гистерезис ВАХ и изменение величины подвижности носителей в бензоле от приложенного поля.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] R. M. Minday, L. D. Schmidt, H. T. Davis. J. Chem. Phys., **54**, 311, 2, 1971. [2] J. Sulocki, A. Szafranek. Acta phys. Polon., **30**, 39, 1971. [3] B. K. Sarkar, S. Basu. J. Chem. Phys. et phys.-chim. biol., **68**, 876, 1971. [4] Б. Л. Тиман, ФТП, **7**, № 2, 225, 1973. [5] Б. Л. Тиман, А. П. Карпова. ФТП, **7**, № 2, 230, 1973.

Днепропетровский инженерно-строительный институт

Поступило в редакцию
21 июня 1974 г.,

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ

О СООТНОШЕНИИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

1. В обычном соотношении неопределенностей квантовой механики (см., например, [1]) содержатся величины с некоммутирующими операторами в некотором чистом состоянии и в один и тот же момент времени. Можно получить более полную информацию о неопределенностях двух величин, рассматривая смешанные состояния, относя величины к различным моментам времени и учитывая корреляцию этих величин.

2. Если ввести скалярное произведение операторов по правилу

$$(\hat{F}, \hat{G}) \equiv \text{Sp} (\hat{\rho} \hat{F}^+ \hat{G}) = \langle \hat{F}^+ \hat{G} \rangle,$$

то на основании неравенства Шварца $(\hat{F}, \hat{F})(\hat{G}, \hat{G}) \geq |(\hat{F}, \hat{G})|^2$, полагая $\hat{F} = \hat{f}(t_1) - \langle \hat{f}(t_1) \rangle$ и $\hat{G} = \hat{g}(t_2) - \langle \hat{g}(t_2) \rangle$, где операторы физических величин $\hat{f}(t_1)$, $\hat{g}(t_2)$ и статистический оператор $\hat{\rho}$ относятся к гайзенберговскому представлению, после

разделения (\hat{F}, \hat{G}) на вещественную (антикоммутаторную) и мнимую (коммутаторную) части, получаем

$$D_{ff}(t_1, t_1) D_{gg}(t_2, t_2) \geq D_{fg}^2(t_1, t_2) + \frac{\hbar^2}{4} \varphi_{fg}^2(t_1, t_2). \quad (1)$$

В левой части этого неравенства находится произведение дисперсий рассматриваемых величин. Стоящие в правой части неравенства величины также имеют простой смысл: для величин f и g функция корреляции флуктуаций

$$D_{fg}(t_1, t_2) = \frac{1}{2} \langle \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} \rangle -$$

центральный корреляционный момент второго порядка, а $\varphi_{fg}(t_1, t_2) = \langle \{ \hat{f}(t_1), \hat{g}(t_2) \} \rangle$ — так называемая функция последействия, определяющая в квантовой теории необратимых процессов [2] линейную реакцию величины f в момент времени t_1 под действием единичного импульса обобщенной силы в момент t_2 при обобщенной координате g ; $\{\hat{f}, \hat{g}\} \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})$ — квантовые скобки Пуассона. Из уравнения (1) непосредственно для среднеквадратичных отклонений (неопределенностей) рассматриваемых величин имеем

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq \sqrt{D_{fg}^2(t_1, t_2) + \frac{\hbar^2}{4} \varphi_{fg}^2(t_1, t_2)}. \quad (2)$$

3. Приведем некоторые примеры и частные случаи.

а) В случае совпадающих моментов времени $t_1 = t_2 = t$

$$\Delta f \Delta g \geq \sqrt{D_{fg}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \langle \{\hat{f}, \hat{g}\} \rangle^2}, \quad (3)$$

где общий для величин временной аргумент t явно не выписан. Произведение неопределенностей определяется не только некоммутативностью операторов рассматриваемых величин, отражающей их физическую несовместимость, но и их взаимной корреляцией.

В частности, для импульса p и соответствующей ему координаты x (вообще для двух канонически сопряженных величин)

$$\Delta p \Delta x \geq \sqrt{D_{px}^2 + \frac{\hbar^2}{4}};$$

для коммутирующих величин (например, для энергии и интеграла движения) или для величин в состоянии с $\langle \{\hat{f}, \hat{g}\} \rangle = 0$ (например, для проекций момента M_x и M_y в состоянии с $\langle M_z \rangle = 0$)

$$\Delta f \Delta g \geq |D_{fg}|;$$

для спиновых величин, связанных с матрицами Паули σ ,

$$\Delta \sigma_x \Delta \sigma_y \geq \sqrt{\langle \sigma_x \rangle^2 \langle \sigma_y \rangle^2 + \langle \sigma_z \rangle^2}.$$

Знак равенства в формуле (3) соответствует чистому состоянию с вектором ψ , удовлетворяющим уравнению

$$(\hat{f} - \langle f \rangle) \psi = \frac{D_{fg} + i \frac{\hbar}{2} \varphi_{fg}}{D_{gg}} (\hat{g} - \langle g \rangle) \psi. \quad (4)$$

В частности, для импульса и координаты это есть состояние в виде гауссова пакета в координатном шредингеровском представлении с перемещением средней точки

$\langle x \rangle$ со скоростью $\frac{\langle p \rangle}{m}$ и $D_{px} = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} D_{xx}$:

$$\psi(x, t) = (2\pi D_{xx})^{-\frac{1}{4}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} x \langle p \rangle + \left(\frac{i}{\hbar} \frac{D_{px}}{2 D_{xx}} - \frac{1}{4 D_{xx}} \right) (x - \langle x \rangle)^2 \right].$$

При $D_{px} = 0$ это есть известный минимизирующий произведение $\Delta p \Delta x$ пакет, отвечающий, например, когерентным состояниям осциллятора, возбуждаемого переменной силой при исходном состоянии нулевых колебаний.

б) Если в правой части неравенства (2) отбросить неотрицательную величину D_{fg}^2 , то приходим к соотношению

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq \frac{\hbar}{2} |\varphi_{fg}(t_1, t_2)|, \quad (5)$$

которое для чистого состояния и при совпадающих временных аргументах $t_1 = t_2$ переходит в обычное, получаемое в курсах квантовой механики (например, [1]) соотношение неопределенностей $\Delta f \Delta g \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{f}, \hat{g} \rangle|$. Еще раз отметим, что обобщенное

соотношение неопределенностей (2) отличается от обычного тем, что, во-первых, рассматриваемые величины относятся к различным моментам времени, во-вторых, учитывается корреляция этих величин, в-третьих, состояние системы может быть смешанным.

в) При отбрасывании в (2) члена с φ_{fg} , а также в классическом пределе

$$\Delta f(t_1) \Delta g(t_2) \geq |D_{fg}(t_1, t_2)|. \quad (6)$$

г) Неопределенности одной и той же величины в разные моменты времени связаны соотношением, содержащим функцию автокорреляции D_{ff} :

$$\Delta f(t_1) \Delta f(t_2) \geq \sqrt{D_{ff}^2(t_1, t_2) + \frac{\hbar^2}{4} \varphi_{ff}^2(t_1, t_2)}. \quad (7)$$

д) В стационарных смешанных состояниях функции корреляции и последствия зависят от разности временных аргументов. В состоянии равновесия с температурой T фурье-образы этих функций по переменной $t_1 - t_2$ непосредственно связаны между собой: $D_{fg}(\omega) = \frac{\hbar}{2i} \varphi_{fg}(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2T}$ (одна из форм флуктуационно-диссипационной теоремы [2]).

ЛИТЕРАТУРА

[1] А. С. Давыдов. Квантовая механика, «Наука», М., 1973. [2] Д. Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», М., 1971.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
24 июня 1974 г.

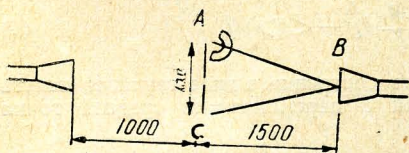
УДК 535.854

Б. Ш. ПЕРКАЛЬСКИС, В. Л. ЛАРИН, Г. Н. СОТИРИАДИ, В. А. СОТКИН,
Ю. П. МИХАЙЛИЧЕНКО

НЕСКОЛЬКО ДЕМОНСТРАЦИЙ С САНТИМЕТРОВЫМИ РАДИО- И ЗВУКОВЫМИ ВОЛНАМИ И ТЕЛЕВИДЕНИЕМ

1. Демонстрация существования краевой волны по Юнгу при дифракции

Юнговский подход к рассмотрению дифракционных задач хотя и был реабилитирован после появления работ Зоммерфельда [1] и Рубиновича [2] и др., но до сего времени очень редко рассматривается в курсах физики и, по-видимому, не демонстрируется. Идея Юнга состояла в том, что дифракционная картина объясняется как результат наложения прямой волны, проходящей через отверстие или мимо препятствия без изменения направления и волн, возникающих на краях препятствия или отверстий. Это представление, вместо обычного френелевского, имеет преимущество большей физичности, ибо вместо элементарных источников рассматриваются краевые волны, источником которых являются индуцированные в краях экранной токи. Нами был рассмотрен ряд опытов,



но их результаты не давали при объяснении особых преимуществ подходу Юнга перед френелевским. Довольно наглядной представляется следующая демонстрация. Вертикальная металлическая пластина шириной 12 см помещена на пути излучения рупорной антенны 3 см клистронного генератора, как показано на рис. 1. Амплитуда приема антенной, помещенной в центре «тени», довольно велика (сигнал с детектора

ISSN 0021 — 3411

**ИЗВЕСТИЯ
ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ**

ФИЗИКА

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

8.79

**ИЗДАТЕЛЬСТВО
ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА**

УДК 530.145

В. В. УЛЬЯНОВ, Е. В. ЕЗЕРСКАЯ

О СООТНОШЕНИИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ. II

1. В первой части [1] работы рассматривались некоторые обобщения соотношения неопределенностей в квантовой механике. В данной части работы исследуются особенности произведения неопределенностей (ПН) координаты Δx и соответствующего импульса Δp частицы. Для этих величин соотношение Гейзенберга в обычной [2] форме $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ является неравенством и служит (не говоря о фундаментальной теоретической [2—5] роли) для оценок квантостатистических флуктуаций координат и импульсов, а также входит в более общие расчетные неравенства, например при нахождении энергии нелинейных нулевых колебаний. Оно устанавливает нижнюю границу ПН, наименьшее принципиально возможное значение ПН, но не дает представления о фактических значениях этой величины для данной конкретной системы (вида поля) в заданном состоянии. Часто соотношение неопределенностей используют для оценок по порядку величины, полагая

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar. \quad (1)$$

Однако существуют состояния, в которых такая оценка (1) оказывается неверной (существенно заниженной). При этом аномально большие значения ПН могут соответствовать как чисто квантовому случаю (квантовые аномалии), так и классическому (классические аномалии).

2. Чисто квантовое явление аномального возрастания ПН возникает в случае движения частицы в стационарных состояниях с малой энергией связи $|E|$. В одномерном потенциальном поле притяжения это относится только к возбужденным состояниям (об основном состоянии см. далее). Волновая функция частицы при этом слабо убывает за пределами поля ($\Psi(x) \sim e^{-x|x|}$), что приводит к большому значению неопределенности координаты

$$\Delta x = x^{-1}/\sqrt{V}, \quad \hbar x = \sqrt{2m|E|} \quad (2)$$

(по сравнению с размерами поля $a \ll \Delta x$ при $\hbar a \ll 1$), а неопределенность импульса $\Delta p \gg \hbar x$, поскольку среднее значение кинетической энергии близко к абсолютной величине среднего от потенциальной энергии и значительно превышает величину

энергии связи: $\frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle \approx |\langle U \rangle| \gg |E|$. В общем случае оценка показывает, что $|\langle U \rangle| \sim |E|^{1/2}$, а следовательно, $\Delta p \sim |E|^{1/4}$ (в связанном стационарном состоянии $\langle p \rangle = 0$). Более детальный анализ дает следующий порядок роста ПН в зависимости от уменьшения энергии связи:

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{U_0}{|E|} \right)^{1/4} \cdot A \gg \hbar. \quad (3)$$

Усилению неравенства в этой формуле способствуют два обстоятельства. Во-первых, энергию связи $|E|$ с помощью соответствующего изменения параметров поля можно сделать как угодно малой (при появлении связанного состояния!). Формула (3), как можно показать, справедлива для слабозвязанных уровней энергии с $n \sim 1$ при $|E| \ll U_0 \sim \hbar^2/ma^2$, а для больших возбуждений $n \gg 1$ при $|E| \ll \hbar^2/ma^2 \ll U_0$, где U_0 — характерная глубина потенциальной ямы. Во-вторых, множитель $A \lesssim 1$. Например, для модели прямоугольной ямы $A = \sqrt{\pi n}$ ($n = 1, 2, \dots$), а для потенциала $U(x) = -U_0 \text{ch}^{-2} x/a$ получается одинаковое для всех возбуждений значение $A = \sqrt{2}$ и т. п. Аналогичная картина наблюдается и в трехмерном локальном поле при появлении каждого связанного состояния.

Явление аномального роста ПН (3) объясняется тем, что вероятность пребывания частицы в области действия поля мала, существен чисто квантовый эффект проникновения частицы в классически недоступную область движения (по квантовым представлениям на границе с областью непрерывного спектра энергии движение становится все менее локализованным). Преобладающим при этом оказывается рост Δx по сравнению с уменьшением Δp .

Особо следует отметить случай одномерного слабого поля притяжения, когда существует единственное связанное состояние, для которого получается обычное

значение ПН в соответствии с оценкой (1): $\Delta p \Delta x = \hbar / \sqrt{2}$. Любопытно, что значительное увеличение неопределенности координат (2) по сравнению с размерами поля здесь полностью компенсируется уменьшением неопределенности импульса: из явного вида [2] энергии связи $|E| = \frac{\hbar^2}{2m} (\int U dx)^2$ и параметрического варьирования по массе

$2m^2 \frac{dE}{dm} = -\langle p^2 \rangle$ вытекает, что $\langle p^2 \rangle = 2m|E|$ и $\Delta p = \hbar \kappa$. Хотя энергия связи в одномерном слабом поле достаточно мала (квадратична по U), но она не может быть сколь угодно малой, как в аномальных для ПН случаях, описываемых формулой (3). В аналогичном же двумерном случае, где энергия связи мала экспоненциально [2], ПН достаточно велико: $\Delta p \Delta x \sim \hbar / \kappa_0 a$, $\hbar \kappa_0 = \sqrt{2mU_0}$, $\kappa_0 a \ll 1$.

3. Наконец, на примере одномерных ветвей движения проиллюстрируем возможность классической аномалии. Здесь большая величина ПН вызывается увеличением каждой из неопределенностей в соответствии с классическим законом: средние значения для стационарных состояний в классическом пределе, т. е. для достаточно больших энергий, переходят в средние по классическому периоду колебаний (см., например, [6]), так что $\Delta p \Delta x \approx \Delta p_{\text{кл}} \Delta x_{\text{кл}} \gg \hbar$. При этом неопределенности по порядку величины совпадают с классическими амплитудами колебаний (по координате и по импульсу).

Для однопараметрических потенциальных моделей из соображений размерности и с учетом того обстоятельства, что в квазиклассические правила квантования [2] входит величина $\hbar n$, заключаем, что для $n \gg 1$ ПН становится аномально большим:

$$\Delta p \Delta x \sim \hbar n \gg \hbar. \quad (4)$$

Например, при всех значениях энергии для гармонического осциллятора имеем точное выражение $\Delta p \Delta x = \hbar (n + 1/2)$, при больших значениях энергии для бесконечно глубокой прямоугольной ямы $\Delta p \Delta x = \hbar n \pi / 2 \sqrt{3}$ и т. п.

4. Помимо разобранных аномальных случаев в стационарных состояниях отметим увеличение ПН при расплывании [3, 4] пакетов («квантовая диффузия») стационарных состояний в свободном движении частицы, когда при произвольной начальной форме пакета неопределенность импульса не изменяется со временем ($\Delta p_t = \Delta p_0$), а неопределенность координаты при больших временах t растет линейно:

$\Delta x_t = \frac{\Delta p_0}{m} t$, так что для $\Delta p_0 \Delta x_0 \sim \hbar$ получаем

$$\Delta p_t \Delta x_t = \hbar \frac{t}{\tau}, \quad (5)$$

где $\tau \sim \frac{m}{\hbar} (\Delta x_0)^2$ означает время расплывания пакета. Заметим, что все сказанное полностью относится и к движению в однородном переменном силовом поле.

Еще можно указать пример термического возбуждения системы, когда неопределенности растут с увеличением температуры. Так, для гармонического осциллятора в термостате $\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \coth \frac{\hbar \omega}{2T}$. При высоких $T \gg \hbar \omega$ температурах $\Delta p \Delta x = \frac{T}{\omega} \gg \hbar$.

Этот пример непосредственно примыкает к рассмотренным в п. 3 классическим аномалиям.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. В. Ульянов. Изв. вузов СССР, Физика, № 2, 146, 1975. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М., «Наука», 1974. [3] А. С. Давыдов. Квантовая механика. М., «Наука», 1973. [4] Д. И. Блохинцев. Основы квантовой механики. М., «Наука», 1976. [5] О. И. Завьялов. Соотношение неопределенностей. Физический энциклопедический словарь, 4, М., «Сов. энцикл.», 1965. [6] В. В. Ульянов, А. И. Халаявин. Изв. вузов СССР, Физика, № 1, 143, 1978.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступило в редакцию
3 июля 1978 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	3
К теории взаимодействия быстрых нейтронов с различными моментами с полупрозрачными ядрами // ЖЭТФ. - 1958. - Т. 35, № 1. - С. 258-264. - Соавт.: Паргаманик Л.Э.	4
On the theory of the interaction of fast neutrons of various angular momenta with semi-transparent nuclei// Sov. Phys. JETP. - 1959. - V. 35 (8), № 1. - P. 177-181. - Соавт.: Паргаманик Л.Э.	12
Особенности квантовомеханического движения в резко изменяющихся полях. Автореферат кандидатской диссертации. – Х.: ХГУ, 1975. - 17 с.	17
Интегральные методы в квантовой теории локальных неоднородностей и периодических структур. Автореферат докторской диссертации. - Х.: ХГУ, 1986. - 28 с.	36
О квазиклассическом движении в особых случаях // УФЖ. – 1973. - Т. 18, № 11. - С. 1848-1859.	65
О структуре энергетических зон в одномерном случае // УФЖ. – 1974. - Т. 19, № 5. - С. 867-868.	77
Про структуру енергетичних зон в одновимірному випадку // УФЖ. - 1974. - Т. 19, № 5. - С. 867-868	79
О структуре энергетических зон в одномерном случае. II // УФЖ. – 1980. - Т. 25, № 3. - С. 468-475. - Соавт.: Косевич Ю.А.	81
О соотношении неопределенностей // Изв. вузов, Физика. – 1975. - № 2. - С. 146-148.	90
О соотношении неопределенностей. II // Изв. вузов, Физика. – 1979. - № 8. - С. 99-100. - Соавт.: Езерская Е.В.	94

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов

ЗБІРКА ОГЛЯДІВ І СТАТЕЙ З КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

(зі співавторами та без)

Частина третя

Російською, англійською і українською мовами

Електронне видання

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

**Издания кафедры теоретической физики имени
академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых)**
К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов
НОВЫЕ КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ(+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов. ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К
ФИЗИКЕ. Ч. 2 (+CD). – 2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.
- 7,8. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВА-
НИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч. 1, 2 (+CD). – 2011, 2012.
- 9,10,11,12. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2, 3, 4. – 2002, 2011.
- 13,14. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ.
Ч. 1, 2. – 2011.
- 15,16. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2. Изд. 2-е, доп. – 2011.
17. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
18. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
19. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 3. – 2004.
20. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 1, 2. – 2011.
21. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 3, 4. – 2012.
22. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ
В НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ
С ПРИМЕСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
23. А.М.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN
NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES
OF ELECTRONS. – 2008.
24. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ
КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА
І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.

200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001,2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОИСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. –2003.
- 15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
 - Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С., Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. II. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Гапон Э.В, Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.III. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т., Ульянов В.В., Шарапов А.И.- 2002.
 - Ч.IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
 - Ч.V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
 - Ч.VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П., Креснин А.А., Манжелей В.Г., Пустовалов В.В., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
 - Ч.VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
 - Ч.X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2003.
 - Ч.XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П., Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
 - Ч.XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З., Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2008.
 - Ч.XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
 - Ч.XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В., Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
 - Ч.XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П., Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
(Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
РОДОСЛОВНАЯ НАШЕЙ СЕМЬИ. – 2004.
15. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ (2-е изд., доп.). – 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНИЧ (+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова. Рисунки отца. – 2011 (CD).
28. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ ЗАВАЛИШИН. – 2011 (CD).
29. В.В.Ульянов
МОЯ МУЗЫКАЛЬНАЯ ИСТОРИЯ (+DVD). – 2011.
30. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2011.

